ISSN0386-8257

臨時別冊・数理科学

SGCライブラリ 134

For Senior & Graduate Courses

量子力学の探究

多面的理解で築く現代物理の基礎

仲 滋文 著



サイエンス社

SGCライブラリ-134

量子力学の探究

多面的理解で築く現代物理の基礎

仲 滋文　著

サイエンス社

SGC ライブラリ（The Library for Senior & Graduate Courses）

近年，特に大学理工系の大学院の充実はめざましいものがあります．しかしながら学部上級課程並びに大学院課程の学術的テキスト・参考書はきわめて少ないのが現状であります．本ライブラリはこれらの状況を踏まえ，広く研究者をも対象とし，**数理科学諸分野**および**諸分野の相互に関連する領域**から，現代的テーマやトピックスを順次とりあげ，時代の要請に応える魅力的なライブラリを構築してゆこうとするものです．装丁の色調は，

数学・応用数理・統計系（黄緑），**物理学系**（黄色），**情報科学系**（桃色），
脳科学・生命科学系（橙色），**数理工学系**（紫），**経済学等社会科学系**（水色）

と大別し，漸次各分野の今日的主要テーマの網羅・集成をはかってまいります．

※ SGC1～80 省略（品切含）

81 繰りこみ群の物理と数理
伊東恵一著　本体 2190 円

82 超重力理論
谷井義彰著　本体 2381 円

85 実例で学ぶ精度保証付き数値計算
中尾充宏・渡部善隆 共著　本体 2362 円

87 量子多体系の物理
藤本聡・川上則雄 共著　本体 2190 円

88 演習形式で学ぶリー群・リー環
示野信一著　本体 2381 円

89 弦理論の代数的基礎
髙橋篤史著　本体 2476 円

90 アインシュタイン方程式
白水徹也著　本体 2238 円

91 CP 対称性の破れ
林青司著　本体 2476 円

92 弦の場の理論
石橋延幸・村上公一 共著　本体 2429 円

93 超弦理論の応用
夏梅誠著　本体 2495 円

94 複素多様体論講義
辻元著　本体 2362 円

95 幾何学の量子化
前田吉昭・佐古彰史 共著　本体 2429 円

96 量子力学から超対称性へ
坂本眞人著　本体 2476 円

97 行列解析ノート
山本哲朗著　本体 2000 円

98 無限量子系の物理と数理
小嶋泉・岡村和弥 共著　本体 2381 円

99 現代宇宙論講義
辻川信二著　本体 2476 円

100 クォーク・ハドロン物理学入門
国広悌二著　本体 2238 円

101 統計力学から理解する超伝導理論
北孝文著　本体 2457 円

102 量子力学ノート
佐藤文隆著　本体 2238 円

103 量子情報と時空の物理
堀田昌寛著　本体 2457 円

104 弦理論と行列模型
土屋麻人著　本体 2238 円

105 ディラック方程式
日笠健一著　本体 2295 円

107 パーコレーション理論講義
樋口保成著　本体 2194 円

108 格子模型の数理物理
南和彦著　本体 2222 円

109 数物系のためのミラー対称性入門
秦泉寺雅夫著　本体 2500 円

110 情報幾何学の新展開
甘利俊一著　本体 2593 円

111 作用素環と無限量子系
松井卓著　本体 2083 円

112 重力とエントロピー
福間将文・酒谷雄峰 共著　本体 2546 円

113 4 次元微分幾何学への招待
松下・鎌田・中田 共著　本体 2315 円

114 ゲージ理論の基礎数理
橋本義武著　本体 2315 円

115 ループ量子重力理論への招待
玉置孝至著　本体 2222 円

116 数理物理における固有値問題
楳田登美男著　本体 2130 円

117 幾何学的に理解する物理数学
園田英徳著　本体 2296 円

118 数物系のためのシンプレクティック幾何学入門
植田一石著　本体 2315 円

119 場の理論の構造と幾何
山崎雅人著　本体 2500 円

120 例題形式で探求する微積分学の基本定理
森田茂之著　本体 2037 円

121 対称性の自発的破れ
菅本晶夫・曺基哲 共著　本体 2315 円

122 可解な量子力学系の数理物理
佐々木隆著　本体 2241 円

123 量子測定と量子制御
沙川貴大・上田正仁 共著　本体 2407 円

124 現代幾何学への招待
宮岡礼子著　本体 2037 円

125 重点解説 スピンと磁性
川村光著　本体 2130 円

126 複素ニューラルネットワーク [第 2 版]
廣瀬明著　本体 2407 円

127 ランダム行列とゲージ理論
西垣真祐著　本体 2194 円

128 数物系のための複素関数論
河村哲也著　本体 2204 円

129 数理物理学としての微分方程式序論
小澤徹著　本体 2204 円

130 重点解説 ハミルトン力学系
柴山允瑠著　本体 2176 円

131 超対称性の破れ
大河内豊著　本体 2241 円

132 偏微分方程式の解の幾何学
坂口茂著　本体 2037 円

133 新講 量子電磁力学
立花明知著　本体 2176 円

134 量子力学の探究
仲滋文著　本体 2204 円

まえがき

量子力学は，1925 年にハイゼンベルクによりその本質の第一歩が切り開かれ，ボルン，ヨルダン，シュレディンガー，ディラック達により，わずか数年の間にほぼ現在の形が建設された．量子力学の建設当初，ハイゼンベルク，ボルン，ヨルダンの行列力学とディラックの演算子形式は微妙に考え方が異なり，またシュレディンガーの波動力学は一見この二つと異質の体系に見えた．これらは変換理論の考え方により，すぐに数学的には同一の体系の異なる表現であることが確認されたが，それぞれの表現に結び付いた物理的なイメージはかなり異なるものであり，確率振幅や干渉のように波のイメージが扱いやすい概念や，力学系の対称性や群構造といった行列の代数と強く結び付いた概念など，概念と手法の有意な結び付きも明らかになった．

言葉を変えて言えば，特定の問題を解いて物理的な情報を導きたいという場合においても，ある方法で簡単に扱える問題が，同じ体系の別表現であるにもかかわらず，他の方法では極めて難問となる場合もあるのである．これは，量子力学が持つ多面的な性格が反映されたものであり，同じ問題を波動方程式，行列力学，経路積分と言った異なる角度から解く経験を積むことにより，より深く量子力学の全貌を知ることができると言える．そこで本書の目的は，幾つかの基本的な問題をあえて異なる手法を基に解析することにより，現代物理学の根底にある量子力学の多面的な理解を図ろうとするものである．このために，一般的な量子力学の教科書では扱われない，やや難解な技法にも踏み込まざるを得なくなったが，これ自体もまた，量子力学の奥行を知る上での役割を果すものと考えている．同じ趣旨で，本書では相互作用を含む場の量子論までは踏み込んでいないものの，ハイゼンベルク–ディラックの正準量子化の発展形であり，フェルミ場の量子化を登場させて量子論の考え方を深化させた，（自由）場の量子化には触れることになった．

この一方で，量子力学には異なる個性の人知が結集された発展の面白さがあり，これを知ることにより量子力学の多面的な性格に，そこに登場する人間の個性を通して近づくことができる．このような狙いの下で，本書を技術的な解説に終始させないために，量子力学の発展小史に関する一章を設けた．さらに，量子力学と関連する話題で，量子力学の解釈とも技術的な表現とも考えられる，確率過程量子化の手法がある．本書ではこれに関する一章をも設け，本書の内容自体に多面的な性格を持たせて，量子力学を自由な視点で理解する試みの楽しさを付け加えた．勿論，発展小史は読み飛ばしたとしても，それ以降の章で解説される量子力学の本質の理解に支障は来さないが，このような性格を持った本書が量子力学の教科書の中に意味のある一石を投ずることができれば，幸いなことである．

最後に，本書を世に出すに当たり大変お世話になったサイエンス社（「数理科学」編集部）の高橋良太氏と校正の実務を担当して戴いた平勢耕介氏に，心からの感謝を申し述べます．高橋氏には，本書の企画の段階から様々な提案を戴き，その提案を実現する形で本書が出来上がった次第です．

また，平勢氏には前著「シュレーディンガー方程式」の時期から，より良い本を目指す支えとなって戴きました．付け加えれば，本書の完成までの過程で高橋氏と平勢氏から戴いた励ましと適切な助言により，本書の内容を一層充実したものにすることができました．

2017 年 3 月

仲 滋文

目　次

第 1 章
量子力学発展小史

本章では，量子力学の発見の契機からその完成形が出来上がるまでの過程と，それに関わった研究者達の個性的な取り組みについて，その概観を述べる．量子力学の完成形は 1925～1926 年には登場したが，量子力学自体はその後も相対論的理論，場の量子論への発展，さらには経路積分のような新しい考え方に基づく手法が登場して強化されている．この小史では，これらの比較的長い歴史の流れを追いながら，次章以降の理論構成に中心をおいた解説の背後にある精神を紹介し，量子力学の奥行と醍醐味を理解する上での一助となることを狙う．

1.1 量子論の発端—黒体輻射と h の登場

自然界には，光速 c，万有引力定数 G，あるいは素電荷 e のような，普遍定数が存在する．プランク定数 h（あるいは，$\hbar = h/2\pi$）は，黒体輻射の表式と関連して 20 世紀の幕開けとともに登場したミクロの世界の普遍常数であり，これを矛盾なく取り入れたミクロの世界の力学を追求した先に，量子力学があった．

19 世紀末，キルヒホッフは「太陽大気」の解明から始まった一連の研究を通して，「同一温度における同一波長の輻射線に対して，輻射能 (E) と吸収能 (A) の比 (E/A) はあらゆる物体において同一である」ことを明らかにした．これによれば，吸収能が 1 の黒体が発する輻射のエネルギーは，物質によらず波長と温度のみで決まる．一方，勃興するドイツ工業を背景として 1887 年にキルヒホッフを所長に迎えて設立された国立物理工学研究所（独）では，ルンマーやウィーンによる黒体輻射の実験を支える機器の開発が進み，輻射の本質を明らかにしようとする学会の機運が高まった．1896 年，ウィーンはマクスウェルによる気体分子の速度分布則を念頭におき，温度 T，振動数 ν の黒体輻射のエネルギー密度の公式*1)

*1) 振動数の微小区間 $\nu \sim \nu + d\nu$ にある（単位体積当りの）輻射のエネルギーを，$u(\nu, T)d\nu$

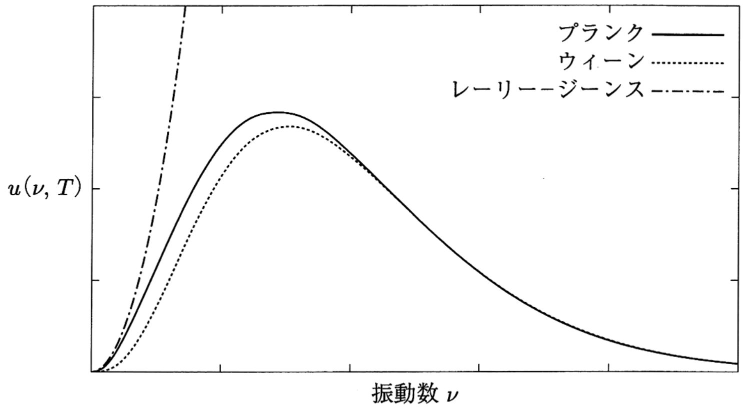


図 1.1 黒体輻射のエネルギー密度：実線はプランクの輻射の公式を表す．ウィーンの公式は高振動数部で実験とよく一致するが，低振動数部でずれを生じる．レーリー–ジーンズの公式は，低振動数部で実験と良く一致するものの，振動数が大きくなるに従って発散する．

$$u(\nu,T) = \alpha\nu^3 \exp\left(-\frac{\beta\nu}{T}\right) \tag{1.1}$$

を導いた．ウィーンの公式は，当時の実験結果をよく説明したが，やがて低振動数部における実験との不一致が明らかになり，修正が必要になった．1900 年に，レーリーは輻射が 3 次元の電磁波であり，その独立な振動のモードにエネルギーが等分配されることを念頭に置いて，低振動数部の輻射のエネルギー密度が $u(\nu,T) \propto \nu^3$ となることを主張した．この形は，1903 年～1905 年にローレンツやジーンズにより補足され，レーリー–ジーンズの公式として知られるようになった．一方プランクは，温度 T の熱平衡系の内部エネルギー U とエントロピー S の関係 $\frac{dS}{dU} = \frac{1}{T}$ を基に，$\frac{d^2S}{dU^2} = \frac{\alpha}{U}$ の仮定からウィーンの公式の指数部分が出ることに注目し，これを $\frac{d^2S}{dU^2} = \frac{\alpha}{U(U+\beta)}$ と拡張して全振動数域で有効な輻射の公式を探った（図 1.1）．

プランクは，まず 1900 年のドイツ物理学協会において熱力学的な考察に基づく試みを発表し，さらに 2 ヵ月後の講演でエントロピーを微視的状態数の対数で表すボルツマンの公式を基に，振動数 ν の**共鳴子**系に対するエネルギーの最小単位 $\epsilon = h\nu$ を仮定して，

$$u(\nu,T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \tag{1.2}$$

が導けることを示した．ただし，プランクの考えていた共鳴子系は，黒体輻射そのものではなく，むしろその源となる物質を念頭に置いたものであった．ここで，k は温度をエネルギーに換算するボルツマン定数であり，プランクはそ

と定義する．なお，後の便宜のため (1.1) は振動数を用いて表したが，ウィーンの論文では，振動数ではなく波長を用いた表式となっている．

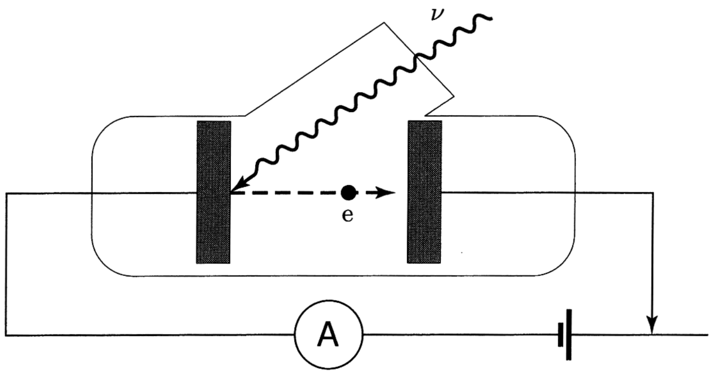


図 1.2　レーナルトの光電効果の実験の概念図：振動数 ν の光量子が陰極から電子を叩き出し，これが陽極に届かないように電圧を調節して，電子の運動エネルギーを検出する．

の値を用いて上の公式を実験と比較することにより，$h \simeq 6.55 \times 10^{-27}\mathrm{erg} \cdot \mathrm{s}$ を得た*2)．

プランクは，当時完成の域に達していた古典物理学を代表する学者であり，自身の発見した自然常数 h の本質は，次の世代のアインシュタインにより明らかにされることになった．アインシュタインは，1905 年の光量子仮説の論文において，プランクのエネルギー量子 $h\nu$ が光を電磁波と考えるマクスウェルの立場と馴染まないこと，またこれを物質的な共鳴子に帰着させることの問題点を論じ，エネルギー量子を黒体輻射そのものの特性と考えた．とくに，体積 v_0 の容器内にあるエネルギー U の黒体輻射に対し，部分体積 v を占める黒体輻射の微視的状態数が $\left(\frac{v}{v_0}\right)^{\frac{U}{h\nu}}$ となることを導き，光の粒子性を指摘した．実際，$\frac{v}{v_0}$ は一つの自由粒子が領域 v 内にある確率であり，$n = \frac{U}{h\nu}$ はエネルギー $h\nu$ のエネルギー量子の個数に他ならない．アインシュタインは，このようなエネルギー量子に結び付く粒子的な光を**光量子**と呼び，1902 年にレーナルトにより観測された光が固体表面から電子を叩き出す光電効果を自然に説明できることを指摘した（図 1.2）．この場合，叩き出された電子の運動エネルギー E_e は，固体表面を脱出する際に失うエネルギーを P として，

$$E_\mathrm{e} = h\nu - P \tag{1.3}$$

となる．アインシュタインは，この式にプランクの h の値を適用したものがレーナルトの実験結果と矛盾しないことを確認し，古典的には波であった光が，ミクロの世界で粒子的な性格を示す 2 面性のあることを，明らかにしたのである．

*2)　プランクの導入した自然常数 h は，$[h \times (\text{振動数})] = [\text{エネルギー}]$ の次元（=単位; $[\cdots]$ で表す）を満たし，従って**作用**の次元である $[h] = [\text{エネルギー} \times \text{時間}]$ を持つ．現在では，$h = 6.620755 \times 10^{-34}\mathrm{J} \cdot \mathrm{s}$（$1\mathrm{J} = 10^7\mathrm{erg}$）であり，プランクは現在値に近い値を算出していた．

1.2 原子模型と前期量子論

プランクの黒体輻射の公式の正当性は，1910 年頃には揺るぎないものになっていたが，そこに現れる h の物理的意味については，なお混乱が続いていた．黒体輻射としての光の源は明らかに物質であるものの，光量子を放出・吸収する物質側の共鳴子の意味は，その正当性すら明らかにされていなかったのである．ところで，黒体輻射の問題以前に原子（元素）の放出・吸収する光のスペクトル線に固有の性質のあることが知られており，黒体輻射に取り組む要因ともなっていた．1885 年に，バルマーは水素原子のスペクトル線の 4 本の波長が $\lambda = \mathrm{const.} \times n^2/(n^2 - 2^2)$, $(n = 3, 4, 5, 6)$ と表せることを発表して注目を集めた．スペクトル線の同様の性質は，リュードベリによっても追及されており，現代の書き方で

$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right)\,,\ (R = 109677.6\,\mathrm{cm}^{-1}\,(\text{当時})) \tag{1.4}$$

と表される構造が，明らかにされた．R は，リュードベリ定数と呼ばれ，上の公式は可視光線波長の（バルマー）系列を表している．より広い波長領域では，その後 $2^2 \to m^2$ と一般化した形で，1906 年に遠紫外領域のライマン系列 $(m = 1, n = 2, 3, 4, \cdots)$，1908 年に赤外領域のパッシェン系列 $(m = 3, n = 4, 5, 6, \cdots)$ 等が，見出されていた．

さて，このようなスペクトル線構造への認識の下に，原子に固有のスペクトル線が現れることを説明しようとする，原子模型の構築も開始された．マクスウェルの電磁場理論によれば，光は電荷の加速度運動により生じる．1903 年，トムソンは平面上のリングに等間隔に配置されて一様な速さで回転する（負）電荷系の磁気的性質を考察し，引き続いて翌年に，この様な電荷系のリングが一様に正に帯電した球の内部に同心円状に閉じ込められて形成する，原子の模型を提案した（図 1.3）．トムソンの模型は，電荷数やリング配置の調整で安定性を示すことができたが，一様な正電荷球の物理的意味は不明で，検証すべき仮説を含んだ模型であった．ところで，トムソンの論文が掲載された学術誌の後半部に，外部磁場の下での原子のスペクトル構造の変化を考察した，長岡半太郎による土星形態の原子模型が掲載されていた．長岡の模型は，大質量の陽電荷球の周りを負電荷系が回る準安定な系として提案されたが，これを疑問視するスコットとの間で激しい論争が生じた．原子模型の探究は，理論のみならず実験的な立場からの追究も必要であった．1908 年に α 粒子がイオン化された He 原子であることを突き止めたラザフォードは，引き続きガイガー，マルスデンと協力して原子に対する α 粒子の散乱実験に取り組み，そこで得られた大角度散乱の測定結果を基に，1911 年に原子は中心部の小さな正電荷を持つ核（原子核）とこれを取り巻く負電荷（電子）系の構造を持つとする，ラザフォード模型を提唱した（図 1.4）．

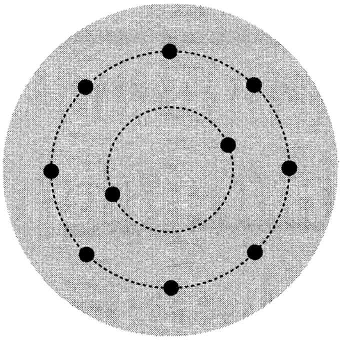


図 1.3　トムソン模型の概念図：グレーの部分は一様に正に帯電した拡がりであり，この中の同心円上に配置された黒丸が，負に帯電した粒子（電子）を表す．

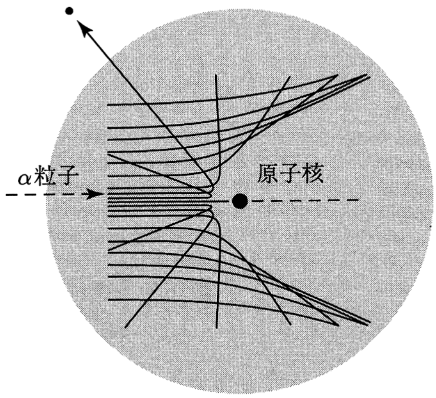


図 1.4　ラザフォード模型：原子核は原子サイズの 10^{-5} 程度の広がりであり，α 粒子は正電荷を持った原子核の近くまで到達し，強いクーロン力で大角度散乱を引き起こす．

ラザフォードの原子模型は，実験事実を説明するために必要な構造を持っていたが，電子の加速度運動による光の放出でエネルギーを失い，安定に形状を保つことができなかった．別の観点からいえば，この模型には電荷と質量の次元を持つ自然定数のみが含まれ，これらを組み合わせて安定な原子の大きさを導く長さの次元を作ることができないのである．このような認識の下に，ボーアは 1913 年の論文で，ラザフォード模型には長さの次元を作るための自然定数を付け加える必要があり，それは黒体輻射や光量子の理論において本質的な役割を果しているプランク定数 h であろうと指摘した．ボーアは，静止する陽子の周りを電子が角速度 $2\pi\nu$ で回転するラザフォード型の水素原子模型を考え，系のエネルギー E を用いて $\nu(E)$ と表した上である種の量子化条件 $|E| = \frac{1}{2}nh\nu(|E|), (n = 1, 2, \cdots)$ を適用し，水素原子のエネルギー

$$E_n = -\frac{2\pi^2 me^4}{h^2}\frac{1}{n^2} \tag{1.5}$$

を導いた．ここで，m, e はそれぞれ電子の質量と電荷である．ボーアは，さらに水素原子が振動数 ν の光（子）を放出・吸収する際のエネルギー保存則（**振動数条件**）を

$$h\nu = E_n - E_m \tag{1.6}$$

の形に表し，これからバルマーの公式の一般形が導かれることを示した．そこに現れるリュードベリ定数の値は実験値と一致し，ボーア理論の正しさを証明することになった．1917 年，アインシュタインはボーアの振動数条件に加え，エネルギー $E_1, E_2(< E_1)$ の状態間の遷移で輻射と熱平衡状態（温度 T）にあ

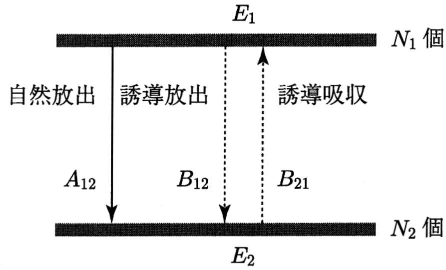


図 1.5 状態の遷移と輻射の平衡： 原子内の電子の遷移 $E_1 \leftrightarrow E_2$ には，自然放出に加えて輻射との相互作用に依存する誘導放出と誘導吸収がある．

る電子は，自然放出と誘導放出の二通りの仕組みで光を放出すると仮定し，プランクの輻射の公式そのものを導いた．アインシュタインは，それぞれの状態にある電子数が $N_i, (i=1,2)$ のとき，自然放出の確率を A_{12}，輻射のエネルギー密度 $u(\nu, T)$ に依存する誘導放出・吸収の確率をそれぞれ $B_{12}u, B_{21}u$ と表し，平衡条件を

$$N_1 A_{12} + N_2 B_{12} u = N_2 B_{21} u \tag{1.7}$$

と置いた（図 1.5）．ここで，電子数はボルツマン因子に比例して $N_i$const. $\times\, e^{-\frac{E_i}{kT}}$ であると考え，振動数条件から $N_1/N_2 = e^{\frac{h\nu}{kT}}$，また $A_{12} = \frac{8\pi u \nu^3}{c^3} B_{21} (= B_{12})$ と置くと，u は黒体輻射のエネルギー密度に一致する．誘導放出の考え方は，現在の量子光学の基礎をなすものとなっている．

ところで，(1.5) を導く際の要であった量子化条件は自明ではなく，ボーアの解釈も混乱に満ちていたが，水素原子のエネルギーを電子の角運動量 L を用いて表すなら，(1.5) は単純な置き換え $L = nh/2\pi$ の結果である．1915 年，ウィルソンは周回運動をする電子の運動エネルギーを運動量 p と速度 v を用いて $2|E| = pv$ と書くと，ボーアの量子化条件が

$$2|E| \int_t^{t+\frac{1}{\nu}} dt = \oint p dq = nh, \ (dq = v dt) \tag{1.8}$$

と表せることに注意し，正準力学系にプランク定数 h を組み入れることを試みた．このような正準力学と h の結び付きは，既に 1911 年頃からプランクやゾンマーフェルトが，h を正準変数の相空間の要素 $\Delta q \Delta p \sim h$ に対応させる視点から指摘していた．1916 年にゾンマーフェルトは，これを発展させる形で周期運動を行う自由度 f の系に対し量子化条件

$$J_i \equiv \oint p_i dq_i = n_i h, \ \ (i = 1, 2, \cdots, f) \tag{1.9}$$

を仮定し，水素（型）原子に相対論的ケプラー運動を取り入れた，スペクトル線の微細構造を導出することに成功した．作用変数と呼ばれる J_k に対する同様の量子化条件は，ゾンマーフェルトより以前に石原純によっても提案されて

いたが，石原の理論は各自由度に亘っての平均操作を含み，これが適用対象を狭めていた．

ボーア–ゾンマーフェルトの量子化条件 (1.9) は，同じ時期にエーレンフェストにより新しい視点が付け加えられた．エーレンフェストは，(1.9) が理論に含まれるパラメーターのわずかな変動に対して安定な断熱不変量であり，これを定数と置くことは妥当で，またこの定数がエントロピーを確率の対数に結び付けるボルツマンの関係に不可欠であることを論じたのである．

このような発展の下に，ボーアは 1918 年から 1923 年にかけて“線スペクトルの量子論”に関わる論文を連作し，(1.9) の量子数 n_i が大きくなるにつれ，量子物理は古典物理の世界に近づくという，**対応原理**を打ち出した．エネルギー E の周期運動の系において，(1.9) から E を $\{J_i\}$ の関数と考えると，$\nu_i = \frac{\partial E}{\partial J_i}$ は周期運動の振動数の一つを与える．そこで，量子数が大きいときに差分 $\Delta J_i = \Delta n_i h$ を微分と考えて，古典的周期系の $\Delta E = h\sum_i \Delta n_i \nu_i = h\nu^c$ と光量子として出し入れする $\Delta E = h\nu$ を同一視して，$\nu^c = \nu$ が導かれることになる．こうしてボーア–ゾンマーフェルトの量子化条件と対応原理は，不完全ながらも古典世界と h の世界を結ぶ切り口を与えて，前期量子論の時代を牽引していった．

1.3 分散理論から行列力学へ

ボーア–ゾンマーフェルトの量子化条件は，前期量子論の要ではあったが，その適用対象が周期運動をする系に限られており，真の量子力学の姿はまだ見えていなかった．真の量子力学への一歩を進める契機を与えたのは，ボーア原子理論の問題点として立ちはだかっていた，分散関係と呼ばれるやはり物質と光の問題であった．古典電磁気学で知られているように，外部から物質に侵入した光は物質中の荷電粒子（電子）を揺さぶり，その荷電粒子の運動から二次的に光を放出させる．この光の出入りが，物質の光に対する屈折率を決定する．振動する外部電場 $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{i\omega t}$ の下で生じる荷電粒子（電荷 e）の電気双極子モーメント $\boldsymbol{P}(= e\boldsymbol{r})$ は，α を分極率として $\boldsymbol{P} = \alpha\boldsymbol{E}$ と書けるから，m を粒子の質量とすると，$\boldsymbol{P}$ は運動方程式

$$\ddot{\boldsymbol{P}} + \gamma\dot{\boldsymbol{P}} + \omega_0^2 = \frac{e^2}{m}\boldsymbol{E} \tag{1.10}$$

を満たす．ここで，$\omega_0(= 2\pi\nu_0)$ は荷電粒子に働く弾性力による固有角振動数であり，γ は摩擦力による減衰係数である．このような運動を考えた時点で，荷電粒子は力学的にトムソン模型における共鳴子に近いものとなり，ボーア模型の軌道電子とは考え難くなる．この問題をしばらく忘れると，(1.10)から $\alpha = e^2/\{m(\omega_0^2 - \omega^2 + i\gamma_0\omega)\}$ が得られ，さらに γ_0 も十分小さいとして無視した形が，α を決定する．そこで現実の原子は，このような固有振動を行う電

子の集団であると考え，固有振動数 ω_k の電子の個数を f_k とすると，原子全体の分極率は

$$\alpha = \frac{e^2}{m}\sum_k \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2} = \frac{e^2}{(2\pi)^2 m}\sum_k \frac{f_k}{\nu_k^2 - \nu^2} \tag{1.11}$$

となり，屈折率 n は $\alpha \simeq n^2 - 1$ と置いて求まる．

さて，このような分散の古典論をボーアの原子理論に結び付ける試みは，1921 年～1924 年にラーデンブルクやクラマースにより着手された．ラーデンブルクは，共鳴子の固有振動数と力学的エネルギーの時間平均を，それぞれ基底状態 E_i と励起状態 E_k 間の遷移に伴う輻射の振動数 $\nu_{ik} = (E_k - E_i)/h$ と輻射のエネルギー $\frac{c^3}{8\pi\nu^2}u_{\nu_{ik}}$ に同一視し，図 1.5 の A_{12} を A_{ki} として

$$P = E\frac{c^3}{32}\sum_{E_k(>E_i)} \frac{A_{ki}}{\nu_{ik}^2(\nu_{ik}^2 - \nu^2)} \tag{1.12}$$

を導いた．この段階で，共鳴子とボーアの原子理論における軌道電子の不整合性は，未解決のまま残っている．一方，クラマースはこの不整合性を解明しようとするボーア–スレーターとの混迷に満ちた仕事の後，1924 年に (1.12) を現象論的に有意な関係式だと認め，光の放出に伴う遷移のみならず光の吸収に伴う遷移も取り入れた形に修正し，他の定数を振動の減衰時間の意味を持つ τ_k にまとめた，

$$P = E\left[\sum_{E_k(>E_i)} \frac{A_k^e\tau_k^e}{4\pi^2 m}\frac{1}{\nu_k^{e2} - \nu^2} - \sum_{E_k(<E_i)} \frac{A_k^a\tau_k^a}{4\pi^2 m}\frac{1}{\nu_k^{a2} - \nu^2}\right] \tag{1.13}$$

を提案した．クラマースは，添字 e, a を用いて放出 (emission) と吸収 (absorption) を区別したが，本来は $A_k^e = A_{ki}, (E_k > E_i)$ 等であり，行列の考え方に今一歩のところまで近づいていた．クラマースは，4 ヵ月後にこの論文への追記の形で，上の関係が大きな量子数の下で差分型から周期運動の作用変数を用いた微分型 $\sum_k h\frac{\partial}{\partial J_k}(\cdots)$ に移行することを指摘した．同様の視点はボルンによっても与えられ，そこで初めて**量子力学**と言う言葉が用いられたが，量子力学が真の意味を確立するためには，新しい世代の登場が必要であった．

1924 年，ボルン門下のハイゼンベルクはボーアの招きでコペンハーゲンを訪れクラマースの分散理論の議論に参加していたが，独自に分散理論に含まれる観測量の表現に狙いを移していった．1925 年，ハイゼンベルクは複雑な原子模型から離れて，単純な 1 次元の周期運動を行う粒子の量子力学を分析した．考え方の流れは，まずこのような周期系の n 番目の量子状態にある粒子の位置座標 $x_n(t)$ と運動量 $p_n(t)$ を，フーリエ展開

$$x_n(t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} x_\alpha(n)e^{2\pi i\alpha\nu_n t} \tag{1.14}$$

で表す．次に大きな量子数に対し，対応原理により (1.9) の量子化条件は，微分型

$$h = \frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn}\int_0^{\nu_n^{-1}} p_n(t)\dot{x}_n(t)dt$$
$$= \frac{d}{dn}\sum_{\alpha} p_\alpha(n)^*(2\pi i\alpha x_\alpha(n)) \tag{1.15}$$

に書いてよい．一方，輻射の振動数は状態の遷移から $\nu_n = \nu(n, n-\alpha) = \frac{1}{h}(E_n - E_{n-\alpha})$ と書くべきであり，これに合わせて $x_\alpha(n) = x(n, n-\alpha)$, ($x(n, n-\alpha)^* = x(n-\alpha, n)$) 等と書き改め，最後に再び対応原理により $\alpha\frac{d}{dn}f(n) \simeq f(n+\alpha) - f(n)$ と離散的な量子状態の差分に戻して，

$$\frac{h}{2\pi i} = \sum_{\alpha}\{p(n, n+\alpha)x(n+\alpha, n) - x(n, n-\alpha)p(n-\alpha, n)\} \tag{1.16}$$

を得たのである．ハイゼンベルクは，(1.9) で量子化された 1 次元振動子のエネルギーと，(1.16) を満たす力学変数の遷移のエネルギーが対応原理的に一致することを確かめ，量子力学の原理を掴んだことを確信した．ハイゼンベルクの発見を伝えられたボルンは，状態間の遷移の総体を表す物理量 $\boldsymbol{x} = \{x_{n,m}\}$, $\boldsymbol{p} = \{p_{n,m}\}$ の拘束条件 (1.16) が行列の代数であることを見抜き，1925 年にヨルダンとの協力の下にこの拘束条件が行列の非対角要素においても成立すること，また運動方程式が行列の力学変数 $(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{p})$ から作られるハミルトニアン $\boldsymbol{H}$ を用いて，交換関係

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{H}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{H}), \tag{1.17}$$
$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{2\pi i}{h}(\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{H}) \tag{1.18}$$

で表現できること示した．(1.17), (1.18) は，ハイゼンベルクの運動方程式と呼ばれ，ここに量子力学の行列力学としての構造が確立したのである．

さて，ハイゼンベルクは，行列力学が電子の軌道のような古典概念を必要とせず，状態の遷移に結び付いた観測量の総体により組み立てられていることに重きを感じた．ところが，新力学の登場から 2 ヵ月後にハイゼンベルクの論文を読んだディラックは，新力学の構造はむしろ古典力学の延長上にあり，古典力学から量子力学への飛躍の本質は，交換関係 (1.16) にあると考えた．1926 年，ディラックは古典力学の正準形式に現れるポアソン括弧（付録 A）と行列力学の交換関係の類似性に注目し，正準量子化条件

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\{A, B\}, \quad \left(\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}\right) \tag{1.19}$$

を提唱した．ここで，A, B は正準変数 (q_i, p_i) の関数として表される古典的物理量であり，$\hat{A}, \hat{B}$ はそれぞれの量子力学的表現である．左辺の括弧は，交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ を表し，これが $h(\neq 0)$ を通して非可換になることか

ら，$\hat{A}, \hat{B}$ は行列表現もその一つに含めた，何らかの演算子に対応する．とくに，ポアソン括弧は $\{p_i, q_j\} = -\delta_{ij}$ を与えるため，(1.16) は $[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = -i\hbar\delta_{ij}$ の意味で (1.19) に含まれる．ディラックの正準量子化は，古典力学の正準形式の上に立って，古典から量子に移行する自然な手順を与えており，現在でも標準的な量子化の手法となっている．ただ，結果として物理量が演算子になる以上，背後には演算される関数空間があることになり，ハイゼンベルク–ディラックと時を同じくして，関数空間の側から量子に取り組む流れが始まっていた．

1.4 ド・ブロイの物質波理論とシュレディンガー方程式

行列力学は，ボルン–ハイゼンベルク–パウリ達により，着々とその有効性が確かめられていったが，行列計算は当時の物理学者にとってなじみが薄く，難解なものでもあった．ところが，当時量子論の研究では一歩遅れていたフランスから，行列力学以上に飛躍のある量子論の大転換が始まろうとしていた．ド・ブロイは，台頭する量子論の影響を受けて兄モーリスと物質によるX線の吸収スペクトルを解析していたが，この過程で光量子説の重要性に気付き，1923年に3部作の論文を著し，エネルギーの定まった物質粒子は光量子と同様に定まった振動数を持つ波として解釈できることを提唱した（図1.6）．

ド･ブロイは，相対性理論と光量子説を軸に据え，まず静止質量 m_0 の粒子の静止座標系（Σ' 系）で，粒子の静止エネルギーを光量子に倣って $m_0c^2 = h\nu_0$ とおき，粒子の**内的な振動数** ν_0 を定義した．現実の光量子は静止質量0であり，これは極めて大胆な飛躍である．次に，ローレンツ変換 $t' = \frac{t - \frac{v}{c^2}x}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}$ により，粒子が速度 v で x 軸方向に移動する座標系（Σ 系）に移り，内的な振動を伝える**物質波**（ド･ブロイは当初位相波と呼んだ）に対し $\sin\{2\pi\nu_0 t'\} = \sin\left\{2\pi\nu\left(t - \frac{x}{V}\right)\right\}$ とおいて，Σ 系における振動数 $\nu = \nu_0/\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}$，位相速度 $V = \frac{c^2}{v}$，および粒子のエネルギー $E = h\nu$ を求めた．このとき，物質波の波長 $\lambda = \frac{V}{\nu}$ を導

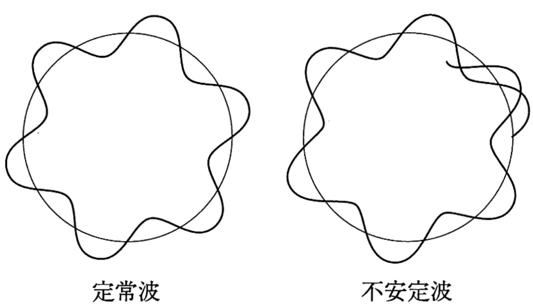


図1.6　ド・ブロイの物質波： $2\pi \times$ (半径) $= n\lambda$ を満たす物質波は安定な定常波となる．これが満たされない場合は，波の山と谷が打ち消し合って消えてゆく（不安定波）．

入すると，粒子の運動量と物質波の波長の関係

$$p = \frac{Ev}{c^2} = \frac{E}{V} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.20}$$

が導かれる．(1.20) が，ド・ブロイの与えた物質波の基本的な性質であり，粒子速度 v は物質波の位相速度 $V(>c)$ とは異なり，物質波の**群速度** $v = \frac{\partial \nu}{\partial\left(\frac{1}{\lambda}\right)} = \frac{\partial E}{\partial p}$ に対応する．

物質波の考え方に従えば，電子が廻る周回軌道の長さが物質波の波長の整数倍であれば，電子は定常波として安定に軌道に存在できる．従って，定常波の条件は

$$\oint_C \frac{dl}{\lambda} = \frac{1}{h}\oint_C pdl = n, \, (n = \text{整数}) \tag{1.21}$$

であり，(1.9) に他ならない．ただ，ド・ブロイ理論は真理の一端を示すことは窺えるものの，その基礎は曖昧で懐疑的な受け止め方が多かった．そういった中で，その真価をいち早く見抜いたのはアインシュタインであった．アインシュタインは，1925 年に物質波の考え方を自身の気体論に取り入れて，ド・ブロイ理論を支持した．この時期，活躍の拠点をウィーン大学からチューリッヒ工科大学に移していたシュレディンガーは，アインシュタインの影響下に物質波を基礎づける**波動力学**の構築に取り組み，古典力学の正準形式と幾何光学の類似性を手掛かりとして，1926 年の前半に物質波の理論を波動力学に発展させる 3 部作の論文を著した．

エネルギー $(=E)$ の保存系において，ハミルトンの特性関数 $S_E(q)$，(q：粒子位置) は幾何光学の波面に対応し (付録 A)，粒子運動量は $S(q) =$ 一定 の超曲面の法線方向 $p = \frac{\partial S_E}{\partial q}$ となって，ハミルトン–ヤコビの方程式 $H\left(q, \frac{\partial S_E}{\partial q}\right) = E$ を満たす（図 1.7）．シュレディンガーは，論文の第 I 部において $\psi = e^{\frac{S_E}{K}}$ を物質波の波動関数に推定し，重ね合わせが成立する線形方程式を得るため合目的的に汎関数 $I[\psi] = K^{-2}\int dV\psi(E-H)\psi$ の変分が 0 になることを要求し，水素原子の波動方程式

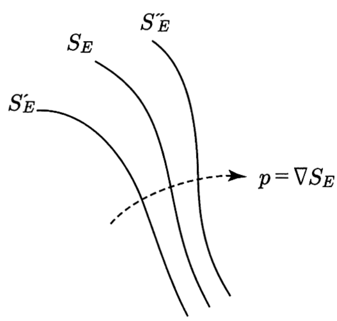


図 1.7　S_E=一定の超曲面が物質波の波面を決定し，それと直交する向きに波の進行方向，即ち粒子の運動量の方向が決まる．

$$\nabla\psi + \frac{2m}{K^2}\left(E - \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0 \tag{1.22}$$

を導く形をとった（現在の記号で，$K = \hbar$）．自身の研究ノートからは，波動方程式の形を先に知っていたことが窺えるが，結果は正しい水素原子のスペクトルを与えるものであった．続く第 II 部では，シュレディンガーは強引な汎関数の変分によらず，幾何光学と波動光学の対応をより前面に出し，全エネルギーの表式において運動量の置換 $\boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$ を行うことにより，波動方程式の導出を行った．さらに第 III 部との中間に位置する論文で，一見形式の異なる波動力学と行列力学の同等性を示したが，この問題はディラック–ヨルダンによっても調べられ，**変換理論**の立場からその意味が明らかにされた．

シュレディンガーの波動力学は，量子力学を物理学者に手慣れた偏微分方程式の問題に戻して注目を浴びたが，波動関数 ψ の意味するものは必ずしも明らかではなかった．シュレディンガーの波動方程式は，$E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ の置き換えで**時間に依存する**形式になり，これより $|\psi|^2$ を保存流の密度とする**連続の方程式**が導かれる．そこでシュレディンガーは，$e|\psi|^2$ が電子の電荷密度を表し，ψ は電子の空間的広がりと関わる**実在波**と考えた．そのためには，電子を表す物質波は空間に点状に局在する必要があったが，この状況は自然には実現できず，ボーアを中心とするコペンハーゲンのグループは，実在波に強く反対する立場をとった．

1926 年の 7 月，ボルンは波動力学を用いてポテンシャル $V(r)$ による電子（平面波）の散乱問題を議論し，散乱角 θ の波に対し $|\psi|^2 \propto |f(\theta)|^2/r^2$ の表式を得て，$|f(\theta)|^2 d(\text{立体角})$ を電子が散乱により微小立体角 $d(\text{立体角})$ に見出される確率と見なすことを提唱した．この考え方は，直ちにパウリ，ヨルダン，ディラックにより一般化され，$|\psi(\boldsymbol{r})|^2 dV$ を粒子が微小領域 dV に見出される確率であり，$|\psi|^2$ を確率密度とする現代に繋がる解釈が成立した．シュレディンガーやアインシュタインは，確率解釈に強く反対したが，そこで生じた論争は，量子力学と観測の関わりをより明らかにする動因ともなった．

1.5 相対論的波動方程式

特殊相対性理論は，1905 年にアインシュタインにより提唱され，その後の検証を経て，波動力学の出現した当時はゆるぎない理論として確立されており，波動力学の相対論化は自然な流れであった．シュレディンガーが波動力学の構築を試行錯誤していた頃の研究ノートにも相対論的な水素原子の波動方程式が記されていて，望ましい原子スペクトルが得られず公表されることはなかったが，後のクライン–ゴルドンの相対論的波動方程式と同じ構造を持っていた．1926 年に，クラインとゴルドンは，それぞれ 5 次元時空の粒子の力学，電磁場と相互作用するスカラー場の力学の立場から相対論的波動方程式を調

べ，とくに自由粒子の場合に，分散関係 $\left(\frac{E}{c}\right)^2 - \boldsymbol{p}^2 = (mc)^2$ から $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$ と置換して得られる**クライン–ゴルドン方程式**

$$\left[\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\right)^2 - \nabla^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi = 0 \tag{1.23}$$

を導く結果を得た．(1.23) は簡単で，明確な相対論的構造を持つ波動方程式であるが，この方程式から導かれる保存流の密度は $|\psi|^2$ ではなく $\frac{i\hbar}{2mc^2}(\psi^*\dot{\psi} - \dot{\psi}^*\psi)$ であり，正定値ではなく確率解釈に結び付かないため，再び ψ の解釈に混乱が生じることになった．

保存流の密度の構造が変わった理由は，クライン–ゴルドン方程式が時間に関する 2 階微分方程式であることによる．1928 年，ディラックは「電子の量子論」において，クライン–ゴルドン方程式を連立方程式に置き換えて，時間に関する 1 階微分方程式にすることを試みた．この場合，ψ は多成分の波動関数になるが，1927 年にパウリにより，電子のスピンの自由度と関連して 2 成分波動関数が導入されたことも，ディラックの試みの背景にあった．そこでディラックは，時空座標と独立した力学変数（行列）$\alpha_\mu, (\mu = 1, 2, 3, 4)$ を導入し，波動方程式を

$$(p_0 + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \alpha_4 mc)\psi = 0, \quad \left(p_0 = \frac{E}{c}\right) \tag{1.24}$$

とおき（記号は原論文），左から $(-p_0 + \boldsymbol{\alpha}\cdot\boldsymbol{p} + \alpha_4 mc)$ を作用させた形がクライン–ゴルドン方程式に戻ることを要請した．このとき，α_μ は代数

$$\alpha_\mu^2 = 1, \quad \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 0, \quad (\mu \neq \nu) \tag{1.25}$$

を満たす必要があり，ディラックはこの代数を満たす最小の行列が 4×4 行列で，その具体形が

$$\alpha_4 = \begin{pmatrix} \mathrm{I} & 0 \\ 0 & -\mathrm{I} \end{pmatrix}, \ (\mathrm{I} : 2 \times 2 \text{ 単位行列}) \tag{1.26}$$

等であることを求めた．この結果，電子の波動関数は 4 成分となり，(1.24) から電子の静止系 $(\boldsymbol{p} = 0)$ において下 2 成分が $E = mc^2$，上 2 成分が $E = -mc^2$ を得て，ψ は負エネルギーの解を含むことになった．また，それぞれの 2 成分は電子のスピンが $\frac{1}{2}$, ($\hbar$ 単位) であることに対応し，電子のスピンと相対論を融合した，相対論的波動方程式が完成したのである．

ディラックは，この波動方程式を基に水素原子の正しい磁気能率を導き，ダービンが与えた補正スペクトルとも整合する結果を得たが，負エネルギー状態の解釈は不明であった．1929 年にディラックは，真空は負エネルギーの電子で占有されており，電子の抜けた穴は正電荷を帯びた反粒子となって，これが負エネルギー解の表すものと考えた．ただし，その時点では，対応する粒子

は発見されておらず，ディラック理論の難点となっていた．1932 年に至り，アンダーソンが宇宙線の観測結果の解析から電子と同じ質量で正電荷の粒子（**陽電子**）を発見し，ディラック理論は全て正しかったことが検証された．

1.6 場の量子論への発展

時空連続体としての場の量子論は，古くは行列力学の完成形であるボルン–ハイゼンベルク–ヨルダンの論文の中でヨルダンが取り上げ，輻射のエネルギーの揺らぎの自乗平均 $\overline{\Delta \boldsymbol{E}^2}$ には粒子的効果と波動的効果が共存しているため，これを理解する上で量子場の視点が重要であると示唆していた．1927 年，ディラックは輻射の放出・吸収のように粒子数の変化する過程の量子論を考察し，相互作用下の状態 ψ を自由粒子の完全系 $\{\psi_r\}$ で $\psi = \sum_r a_r \psi_R$ と展開し，規格化 $\sum_r |a_r|^2 = (\text{粒子数})$ を演算子的に表現するため，a_r を力学変数 b_r にすり替えて，

$$b_r = e^{-\frac{i}{\hbar}\theta_r} N^{\frac{1}{2}} = (N_r + 1)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta_r}$$

$$b_r b_r^* - b_r^* b_r = 1 \quad \text{etc.}$$

等の交換関係を設定した．これにより，確率に結び付く状態にすぎなかった波動関数が，それ自体でエネルギー・運動量を担う力学変数としての場に昇格することになった．この段階で，上の置き換えと配位空間上の場の量子化の関係は明確にされていなかったが，引き続きヨルダン–クラインによるボーズ場の量子化，ヨルダン–ウィグナーによるフェルミ場の量子化が追究され，**第 2 量子化**と呼ばれる手法の基礎が確立された．付け加えると，シュレディンガー波動関数をエネルギー固有値 E_n の状態 $\phi_n(\boldsymbol{x})$ で $\psi(t, \boldsymbol{x}) = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\phi_n(\boldsymbol{x})$ と展開した際，第 2 量子化は $\sum_n a_n^\dagger a_n$ に粒子数の性格を，同時に $\psi(t, \boldsymbol{x})$ に多粒子数状態を重ね合わせた波動場の性格を与えることになり，粒子と波の二重性にも新しい視点をもたらした．

さて，量子場は無限自由度の力学系であり，ヨルダンが 1926 年に指摘したように，個々の自由度の 0 点エネルギーの和は基底状態のエネルギーに無限大を付与する．また，量子場の理論は相互作用を通して粒子数の変化する過程を取り込み，その過程の摂動計算の下で無限大を生じる場合も存在する．1930 年にワラー，オッペンハイマーが，また 1934 年にワイスコップが，電子が放出した光子を再吸収する自己エネルギーの過程に，$\log(\infty)$ 型の発散が生じることを指摘した．1934 年には，ディラック–ハイゼンベルクも，陽電子のホール理論を基に同じ結論を得ている．

このような発散は，水素（型）原子のエネルギー準位にも影響する．ディラックの相対論的波動方程式を基に，原子番号 Z が小さい水素型原子（主量子数 n，全角運動量 j，電子質量 m）の静止エネルギーを起点とするエネルギー

準位を求めると，α を微細構造定数として

$$E_{n,j} = mc^2 \left\{ \underbrace{-\frac{(Z\alpha)^2}{2n^2}}_{\text{ボーア模型}} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^4}\left(\frac{n}{k} - \frac{3}{4}\right) + \cdots \right\}, \quad \left(k = j + \frac{1}{2}\right)$$

が得られ，$2S_{1/2}$ と $2P_{1/2}$ 状態は縮退している．1946 年 6 月，シェルター・アイランドで開催された物理学会で，ラム–レザフォードはこの状態間に 4.327×10^{-6} eV の分離があることを報告した．このような分離は，原子中の電子の位置が量子場としての光の 0 点振動により揺らぎを生じ，クーロンポテンシャルに影響を及ぼすことにより生じる．会議に出席していたベーテは，その帰途に非相対論の枠組みで，揺らぎの効果を評価してしまった．ベーテは，まず揺らぎの効果である自己エネルギー W の 2 次発散項 $W_0 = -\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} \times \delta m$ を電子の運動エネルギーにくり込んで，

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m} + W_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\mathrm{e}}}, \quad (m_{\mathrm{e}} = m + \delta m)$$

とまとめ，m_{e} を電子の観測質量に置き換えた．次いで，準位の分離に関わる対数発散項 $W' = W - W_0$ を非相対論的エネルギーの上限 $K = mc^2$ で切断し，ラム–レザフォードの分離を説明する W' の値を得たのである．

その後，ベーテ理論を相対論的枠組みの中で発展させてくり込みの手法を完成させるため，ベーテ，朝永–シュウィンガー，ファインマン等の量子力学の創成期を思わせる多彩な取り組みが現れ，この過程を経て量子電磁力学は完成されていった．とりわけ，ファインマンの相互作用のダイアグラムを直接摂動計算に結び付ける手法は，ダイソンにより 1948 年に S 行列を T 積の下で展開する枠組みの中で基礎づけられ，その後の場の量子論の実用的な算法として，なくてはならぬものとなった．

1.7 経路積分と量子力学の拡がり

経路積分は，行列力学，波動力学に続く量子力学への第 3 の手法として，ファインマンにより 1948 年に提唱された．1945 年，ファインマンはホイーラーの下で，量子電磁力学の無限大の元凶と思われる場の自由度を用いることなく，電磁力学と等価な粒子間の力学を与える遠隔相互作用の理論を追究していた．ファインマンは，この理論を量子的に扱うために，力学系の作用（積分）と量子状態を直接結び付ける手法を模索する中，1932 年にディラックが関連する論文を発表していることを知った．ディラックはその論文で，時刻 T の位置 q_T から時刻 t の位置 q_t への量子力学的な遷移の確率振幅 $(q_t|q_T)$ は，古典力学における作用（積分）と

$$(q_t|q_T) \quad \overset{\text{対応}}{\longleftrightarrow} \quad \exp\left[i\int_T^t dtL/\hbar\right], \quad (L：\text{ラグランジアン}) \tag{1.27}$$

の関係にあると記した．この「対応」の意味を明確にするために，ファインマンは微小時間間隔 (t_i, t_{i-1}) で試みに $(q_i, q_{i-1}) = \frac{1}{A}\exp[i\int_{t_{i-1}}^{t_i} dtL/\hbar]$ とおいて A を決定し，遷移確率振幅のユニタリ性から

$$(q_t|q_T) = \lim_{N\to\infty}\int\prod_{j=1}^{N-1}\frac{dq_j}{A}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\int_{t_{i-1}}^{t_i} dtL\right] = \int_T^t \mathcal{D}e^{\frac{i}{\hbar}S} \quad (1.28)$$

$(t = t_N, T = t_0)$ と考えた．結果は正しい遷移の確率振幅を導き，ファインマンは 1948 年にこの手法を「非相対論的量子力学の時空的方法」と題して発表した．現在，**経路積分**と呼ばれるこの手法は，$\hbar \to 0$ の極限で古典力学の最小作用の原理とも関連し，量子力学に新しい視点をもたらすと共に，量子力学の実用的で強力な問題解法の手段を与えることになった．

ファインマンが最初に与えた経路積分は配位空間の経路に亘るものであったが，1952 年にファインマン自身により相空間の経路積分にも拡張され，一般に連続変数の積分で完全系が構成できる状態空間では，経路積分により遷移の確率振幅を与えられることが分かった．一方，1950 年代後半に，ベレジンによりスピンのように離散変数で完全系を作る場合においても，$\theta_i\theta_j + \theta_j\theta_i = 0$ のグラスマン変数の経路積分の意味で，遷移の確率振幅を構成できることが示された．これにより，経路積分の手法は，ボーズ場のみならずフェルミ場も含めた幅広い量子場の理論に適用できることになり，現代の場の量子論の興盛の一端を担う役割を果している．

付け加えれば，経路積分の重み $e^{\frac{i}{\hbar}S}$ が時間の解析接続 $t = -i\tau$ の下で確率過程の重み $e^{-\frac{\bar{S}}{\hbar}}$ となることから，経路積分の確率過程による表現も試みられた．1981 年にパリジ-ウーは，仮想時間を使った古典的運動 $\frac{\delta S}{\delta x}$ を平均値とするランジュバン方程式から，その解の確率分布が仮想時間の長時間極限で $e^{-\frac{\bar{S}}{\hbar}}$ となることを示し，経路積分を実行する上での新しい技術的側面も切り開かれた．

1.8 量子力学と数学の交叉

量子力学の建設は，数学者にも少なからぬ興味を与え，物理と数学の交流の一翼も担った．この過程で，物理学者が数学的に既知の事実を再発見したこともあり，また物理の側から，数学の新分野開拓への刺激を与えたこともあった．

例えば，ハミルトンの特性関数が $S_E = \sum_i S_E^{(i)}(q_i)$ と変数分離可能な多自由度の周期運動を行う系において，(1.9) の作用変数を用いて $w_i = \frac{\partial S_E^{(i)}}{\partial J_i}$ で定義される角変数が運動の 1 周期に 1 だけ変化するため，力学変数が (1.14) の形のフーリエ級数で表現されるが，この結果は 70 年前にドロネーよる天体力学の研究で知られていた．また，波動関数を $\psi = \exp\{\frac{i}{\hbar}(S_0 + \frac{h}{i}S_1 + \cdots)\}$ と展開すると，S_1 がハミルトンの特性関数となり，S_1 までの近似（準古典近似）

による解の接続条件から $J = \left(\text{整数} + \frac{1}{2}\right)\hbar$ が導かれるという，ヴェンチェル，クラマース，ブリルアンの量子力学の研究に対しても，1923 年にジェフリーによる数学の側からの先駆的な仕事があった．とは言え，ハイゼンベルク–ディラックにより物理量を演算子として表現する量子力学の手法が提唱された当時は，これと密接に関連する関数空間の研究は，ヒルベルト，リース，バナッハ達により整備が進められる途上にあった．

量子力学の初期の段階で，シュレディンガーが固有値問題を解くにあたり同僚の数学者であるワイルの協力を求めたこともあったが，建設的な数学からの提案としては，1926 年にウィーナーがボルンとの協力研究で，物理量 q に対応する行列を直接エネルギーを用いて

$$q(E, E') = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} dte^{-\frac{2\pi i}{h}Et} qe^{\frac{2\pi i}{h}E't} \tag{1.29}$$

で表現する手法があった．ここで，q は何らかの意味での演算子であるが，その背景にある状態空間については，明確にされていなかった．状態空間の考え方は，1925 年〜1926 年のヨルダン，ディラック，ロンドンによる量子力学における**変換理論**の追究を通して明確になった．古典力学の正準変数による運動の記述は，正準変換により物理的に同等な他の正準変数による運動の記述に移ることができる．このような変換の自由度は，量子力学では $Q_i = Sq_iS^\dagger, P_i = Sp_iS^\dagger$ のようなユニタリ変換で表され，これに伴い状態空間も $\Psi = S\psi$ のような変換を受ける．このような変換に，波動方程式と行列力学の見かけ上の違いも吸収できるが，ディラックは量子力学を構成的に組み立てる中で，連続変数の行列も含めるためにクロネッカーデルタを拡張し，

$$\delta(\xi - \xi') = 0,\ (\xi \neq \xi') \quad \text{および} \quad \int d\xi \delta(\xi - \xi') = 1 \tag{1.30}$$

を満たすデルタ関数を導入した．ディラックは，通常の関数の極限として慎重に取り扱ったが，その構造は数学者にも少なからぬ刺激を与えた．フォン・ノイマン–ヒルベルト–ノルドハイムは関数空間上でデルタ関数的な演算子を含む代数を探り，量子力学の数学整備を試みたが，公理化された二乗可積分なヒルベルト空間を背景とする構造には至らなかった．このような状態空間の必要性は，シュレディンガーに先駆けて積分方程式としての波動方程式を提唱したランチョスが気付いており，ヨルダンにより量子力学の基礎となる状態空間として整備された．

公理的なヒルベルト空間における量子力学の表現は，ノイマンの手により進められていったが，ノイマンはデルタ関数を変換理論の弱点と考え，状態のスペクトル分解は射影演算子のスチュルチェス積分表示を基に定式化した．ノイマンは，さらに量子統計や量子力学の観測の理論まで含めた幅広い考察を行い，その成果は『量子力学の数学的基礎（1932 年）』にまとめられて，物理そのものを牽引する流れを作った．一方，1940 年代の後半より，シュヴァルツの**超**

関数やゲルファントの**一般関数**の理論が登場し，デルタ関数の数学的意味づけが可能になった．デルタ関数を用いたディラックのスペクトル分解の方法や変換理論は，そのままで見通しの良い正しい手法だったのである．現在では，量子力学はヒルベルト空間 $\mathbb{H}$ とその上の汎関数空間 Φ^X，および核空間 Φ からなる三つ組の構造 $\Phi \subset \mathbb{H} \subset \Phi^X$ で表現されている．付け加えると，ディラックは自身の量子力学の体系の中で，状態の内積 $\langle\phi|\psi\rangle$ をブラ状態 $\langle\phi|$ とケット状態 $|\psi\rangle$ に分解し，それぞれ独立した状態として扱うことを提案したが，その手法は三つ組空間の自然な表現となっていた．

前節で述べた，量子力学の第 3 の手法である経路積分の登場も，無限次元の積分測度の問題，確率過程との関係等で，数学者にも興味深い話題を提供することになった．自由粒子のシュレディンガー方程式は，時間の解析接続 $t = -i\tau$ の下で拡散方程式と同じ形になる．量子力学は絶対値の 2 乗が確率となる波動関数を扱い，確率過程は確率そのものを扱う違いはあるが，両者は関連する構造を持っている．経路積分に類似した無限次元の積分測度は，1930 年頃よりウィーナーにより導入されており，キャメロンも確率過程の立場から同様の積分測度を研究していた．ファインマンの経路積分は，ポテンシャル場の中の粒子の遷移確率密度を与えたが，1949 年にカッツはウィーナーの手法をポテンシャル場の中でブラウン運動を行う粒子に拡張し，ファインマン理論に結び付く結果を得た．経路積分の測度の研究は，1950 年代においてもシーゲル，ゲルファント–ヤグロム等により進められた．経路積分自体は，モンテカルロ法のような数値的手法にも適合して，現代物理の強力な研究手段に発展した．

量子力学と確率過程との関わりでは，1966 年にネルソンにより提唱された試みも，物理学者の意表を突くものであった．ネルソンの理論では，質量 m の粒子のニュートン方程式と，拡散係数 $\frac{\hbar}{2m}$ のブラウン運動を組み合わせたものが，シュレディンガー方程式と等価になることが導かれる．この理論は，個々の問題で必ずしも満足な結果を導くことができなかったが，量子力学の解釈に新しい視点を与え，今なお興味ある研究対象となっている．量子力学の奥行は深く，物理と数学が交叉する形で量子力学の新しい側面が見出されることは，今後も期待される．

第 2 章
シュレディンガー方程式と量子力学の基本構造

この章では，シュレディンガー方程式を基礎において，波動関数の表示の問題，波動関数の解釈，波動関数が構成する関数空間の捉え方等，量子力学の基本構造に関わる考え方をまとめる．また，その理解を確実なものにするために，実際に“解ける”基本問題について，これらの基本構造がどのように活かされているかを確かめる．

2.1 正準量子化と二つの表示

ハイゼンベルク–ディラックにより確立された正準量子化は，古典力学の正準形式（付録 A）を基に，(1.16) に従って量子力学を構築する．正準変数 (q_i, p_i), $(i = 1, 2, \cdots, N)$ で記述される系の場合，同時刻の正準変数はポアソン括弧 $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$ を満たし，量子力学において対応する演算子（ハット “$\hat{}$” を付けて表す）は**正準交換関係**

$$[\hat{q}_i(t), \hat{p}_j(t)] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{q}_i(t), \hat{q}_j(t)] = [\hat{p}_i(t), \hat{p}_j(t)] = 0 \tag{2.1}$$

で特徴づけられる*1)．また，正準変数の関数である物理量 $A(t) \equiv A(q(t), p(t))$ の正準運動方程式 (A.17) は，(1.16) の量子化によりハイゼンベルクの運動方程式

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{A}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}(t), \hat{H}]} \tag{2.2}$$

に置き換えられる*2)．ここで，$\hat{H}$ は系のハミルトニアン $H(q, p)$ に対応する

*1） ディラックは，通常の数で表される古典力学の変数を **c 数**，演算子化された量子力学の変数を **q 数**と呼んだ．

*2） $A(t) \equiv A(q(t), p(t), t)$ のように，物理量 A があらわに時間に依存する場合，(2.2) は，$\frac{d}{dt}\hat{A} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t}$ の形となる．

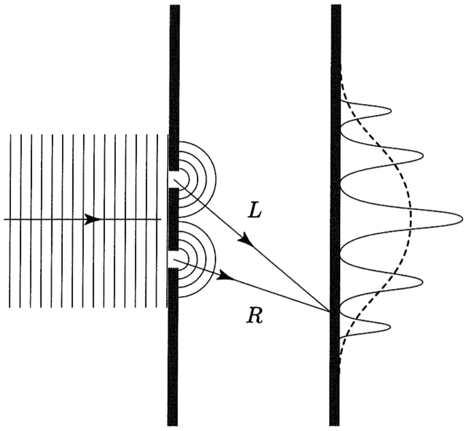


図 2.1　二重スリットの思考実験: 平面波（粒子）が二重スリットを通過後，右端のスクリーンに到達する．スリット位置で粒子の“何れかの通過”を確認しなければ，スクリーンへの到達頻度に波の特徴である干渉縞が現れる．確認すると，干渉縞が消える．

演算子 $\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$ であり．断りの無い限り $\hat{H}$ が時間に依存しない場合（保存系）を考える．容易に確かめられるように，$\hat{A}(t)$ の t 依存性は，具体的に

$$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{2.3}$$

と表すことができる．左辺の $\hat{A}(t)$ は，ハイゼンベルクが行列力学で扱った時間に依存する演算子で，**ハイゼンベルク表示**の演算子と呼ばれる．一方，$\hat{A}$ は**シュレディンガー表示**の演算子と呼ばれ，ハイゼンベルク表示の演算子の初期値となって時間に依存しない．明らかに，ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ は $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \hat{H}$ により，常にシュレディンガー表示である．また，同時刻の正準交換関係 (2.1) も表示により形を変えず，シュレディンガー表示の場合も $[\hat{q}_i,\hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$ 等である．

物理量を表す演算子 $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ は線形演算子で，ハイゼンベルクの行列力学であれば無限次元のベクトル空間を，またシュレディンガーの波動力学では波動関数の空間を，演算の及ぼされるベクトル空間（線形空間）として伴う．このような関数空間の要素 ψ は**状態**あるいは**状態ベクトル**と呼ばれ，空間の ψ_1,ψ_2 が系の状態空間（状態ベクトルの空間）に属すれば，

$$\psi = \alpha\psi_1 + \beta\psi_2,\ (\alpha,\beta:\ \text{複素定数}) \tag{2.4}$$

もまた，同じ状態空間に属すると考える．ボルンに始まる量子力学の基本的な解釈では，$|\psi|^2$ は ψ が担う系の物理的状態が見出される確率と結び付く．従って，ψ が粒子の状態であるなら，粒子は自分自身の異なる状態の重ね合わせで表され，しかも粒子の状態確率には分解された自分自身との干渉効果 $\mathrm{Re}(\psi_1^*\psi_2)$ が表れることになる（図 2.1, 2.2）．量子力学は，粒子と波の理論形

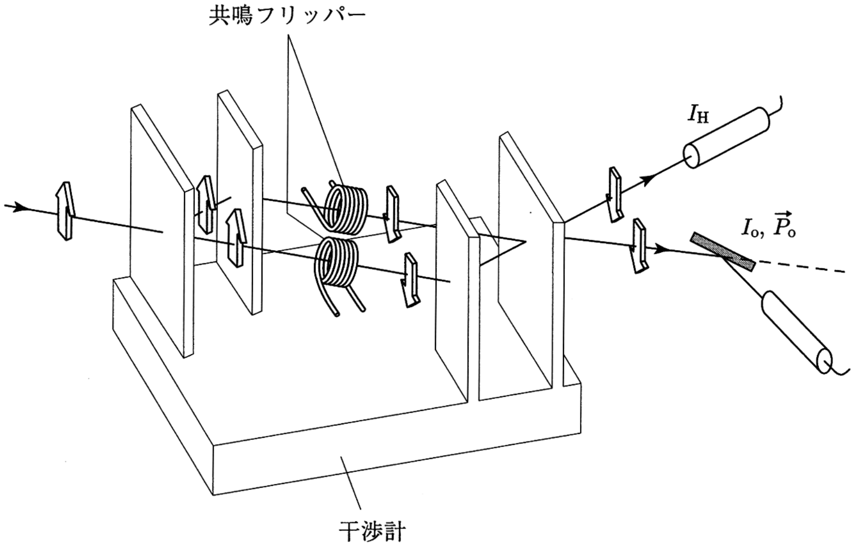


図 2.2　中性子自己干渉実験（図は文献 [16] より）: 二重スリットに対応する実験．スピンの偏極した中性子流がシリコン結晶で二つに分解され，それぞれが歪対称に配置されたスピン共鳴フリッパーを通過した後，再結合する．二つのフリッパーが同期されて“何れかを観測しない”とき，経路の位相差による干渉効果は残る．非同期の場合は，干渉効果は消える．

式が一体となって構成されていて，観測の手段に応じてそれぞれの特性が現れる**二重性**を持っている．

さて，状態ベクトルの引数の構造は，正準交換関係の表現と一体となって定まり，とくに表現を選ぶ必要のない場合は，ディラックに従って**ケットベクトル**記号 $|\psi\rangle$ で表す．この記号を用いてシュレディンガーが見出した波動方程式を書き下すと

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(\hat{q},\hat{p})|\psi(t)\rangle \tag{2.5}$$

となる．ここで，$(\hat{q},\hat{p})$ はシュレディンガー表示の演算子で時間に依存しないため，$|\psi(t)\rangle$ は形式的に解くことができ，

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi\rangle \tag{2.6}$$

と求まる．$|\psi(t)\rangle, (t>0)$ はシュレディンガー表示の状態ベクトルと呼ばれ，その初期値である $|\psi\rangle$ は，ハイゼンベルク表示の状態ベクトルと呼ばれる．従って，二つの表示を初期時刻 $t=0$ で一致させると，両者の関係は，

	シュレディンガー表示	ハイゼンベルク表示
状態	$\|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\|\psi\rangle$	$\|\psi\rangle$
演算子	$\hat{A}$	$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$

とまとめられる．とくに，シュレディンガー表示の初期状態が，方程式

$$\boxed{(\hat{H}-E)|\psi_E\rangle = 0} \tag{2.7}$$

を満たすハミルトニアンの固有状態 $|\psi_E\rangle$ である場合，(2.6) は

$$|\psi_E(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\psi_E\rangle \tag{2.8}$$

となって，時間的に定まった（角）振動数 $\omega = E/\hbar$ で変動する状態となる．このような状態 $\psi_E(t)$ あるいは ψ_E は，**定常状態**と呼ばれる．定常状態を決定する (2.7) は，シュレディンガーが最初に提案した波動方程式 (1.22) であり，(2.5) を**時間に依存するシュレディンガー方程式**，(2.7) を**時間に依存しないシュレディンガー方程式**と呼んで区別する．

次に，有限次元の複素ベクトルと同様に，状態ベクトルに以下の性質を持つ内積 $\langle\phi|\psi\rangle$ が定義できると考える．

$$1)\ \ \langle\phi|\psi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle^* \ \ (\langle\psi|\psi\rangle = \text{正実数} < \infty), \tag{2.9}$$

$$2)\ \ \langle\phi|\big(\alpha|\psi\rangle + \beta|\psi'\rangle\big) = \alpha\langle\phi|\psi\rangle + \beta\langle\phi|\psi'\rangle. \tag{2.10}$$

この様な内積の導入された空間では，$\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$ により状態のベクトルの大きさ（ノルム）が定義され，$\phi = \psi$ は $\|\phi - \psi\| = 0$ の意味になる[*3)]．

ディラックは内積の対となる $\langle\psi|, \langle\phi|, \cdots$ がそれ自体ケットベクトル $|\psi\rangle, |\phi\rangle, \cdots$ とは別の意味を持つ状態ベクトルと考え，ブラベクトルと呼んだ[*4)]．ブラ・ケット記号を用いると，状態 ψ に演算子 $\hat{A}$ を作用させて生じた状態 $\hat{A}\psi$ と状態 ϕ の内積は

$$\langle\phi|\hat{A}\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle = (\hat{A})_{\phi\psi} \tag{2.11}$$

と書ける．ここで $(\hat{A})_{\phi\psi}$ は，$\hat{A}$ を行列と考えた場合の ϕ 行 ψ 列要素に対応する表記である．とくに (2.3), (2.6) から，演算子の行列要素は

---

*3) 大まかには，このようなノルムの導入された空間で，コーシー条件 $\|\psi_n - \psi_m\| \to 0, (n, m \to 0)$ を満たす点列 $\{\psi_n\}$ がその空間の中で収束するとき，そのノルム空間を $\mathbb{H}$ と書き，ヒルベルト (D. Hilbert) 空間と呼ぶ．$\mathbb{H}$ はボルンの確率解釈を容易に持ち込むことができるが，多くの演算子の作用の下で $\mathbb{H}$ は閉じず，必要に応じて量子力学はより広い関数空間の枠組みの中で考えなくてはならない（付録 C）．

*4) ブラ，ケットはディラックの造語で，内積の括弧記号の英単語を bra·c·ket と分解し，bra→ $\langle\phi|$, ket→ $|\psi\rangle$ と対応させたものである．これは，有限次元の複素成分ベクトルで言えば，行ベクトルと列ベクトルを区別して，

$$\langle \boldsymbol{a}| = \underbrace{[a_1^*, \cdots, a_N^*]}_{\text{行ベクトル}},\ |\boldsymbol{a}\rangle = \underbrace{\begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix}}_{\text{列ベクトル}} \Rightarrow \text{内積：} \langle\boldsymbol{a}|\boldsymbol{b}\rangle = [a_1^*, \cdots, a_N^*]\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^N a_i^* b_i$$

と表記することに対応する．

$$\langle \psi | \hat{A}(t) | \phi \rangle = \langle \psi(t) | \hat{A} | \phi(t) \rangle \tag{2.12}$$

の意味で，表示によらぬ値になることが分かる．逆に言えば，観測量と結び付く行列要素は表示に依らぬことを要請すると，行列力学の時間依存性は必然的に (2.6) の形で波動関数の時間依存性に移し替えられてシュレディンガー方程式 (2.5) を決定し，ハイゼンベルクとシュレディンガーの二つの流れは同じものを別の側面から見ていたことになるのである．

練習問題 2.1.1

演算子の指数関数は，その和がノルム収束するものとして，

$$e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^n = 1 + \left(\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right) + \frac{1}{2!}\left(\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right)^2 + \cdots$$

と定義できる．これから，$\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ が運動方程式 (2.3) を満たすことを確かめよ．

解答 展開形から，$\frac{\partial}{\partial t}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\pm\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ は明らか．従って，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{A}(t) &= \left(\frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} + e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)\\ &= \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{A}(t)]. \quad \square\end{aligned}$$

練習問題 2.1.2

演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対し，α を c-数として展開形

$$e^{\alpha\hat{A}}\hat{B}e^{-\alpha\hat{A}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\underbrace{[\hat{A}, [\hat{A}, [\cdots[\hat{A},}_{n\ 個}\hat{B}]\cdots]]]$$

が成立することを確かめよ．

解答 $\hat{f}(\alpha) = e^{\alpha\hat{A}}\hat{B}e^{-\alpha\hat{A}}$ に対し

$$\frac{d}{d\alpha}\hat{f}(\alpha) = [\hat{A}, \hat{f}(\alpha)], \quad \frac{d^2}{d\alpha^2}\hat{f}(\alpha) = [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{f}(\alpha)]], \ \cdots$$

は明らか．従って，$\hat{f}(0) = \hat{B}$ に注意して $\hat{f}(\alpha)$ をテイラー展開すると，

$$\hat{f}(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}\hat{f}^{(n)}(0) = \hat{B} + \frac{\alpha}{1!}[\hat{A}, \hat{B}] + \frac{\alpha^2}{2!}[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] + \cdots$$

となって，求める結果が得られる．□

注）この展開形は有用で，色々な場面でよく使われる．一例をあげると，

$$e^{\frac{i\lambda}{\hbar}\hat{p}}\hat{q}e^{-\frac{i\lambda}{\hbar}\hat{p}} = \hat{q} + \frac{i\lambda}{\hbar}[\hat{p}, \hat{q}] = \hat{q} + \lambda, \quad \left(\frac{i\lambda}{\hbar}[\hat{p}, \hat{q}]\ \text{以降の交換関係は}\ 0\right)$$

であり，運動量は粒子位置を移動させる演算子であることが分かる．

2.2 物理量の観測値と固有状態

量子力学の演算子においても有限次元行列の場合と同様に，行列要素 (2.11) に複素共役と転置を施した結果を $(\hat{A})^*_{\psi\phi} = (\hat{A}^\dagger)_{\phi\psi}$ とおいて，$\hat{A}$ に**エルミート共役**な演算子 $\hat{A}^\dagger$ を定義することができる．ブラ・ケット記号を使えば

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^* = \langle\phi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle \quad (= \langle\hat{A}\phi|\psi\rangle\,) \tag{2.13}$$

である．とくに $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ である場合，演算子 $\hat{A}$ は**エルミート演算子**と呼ばれ，その対角要素 $(\hat{A})_{\phi\phi} = \langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle$ は (2.13) より実数である．逆に，任意の状態による対角要素が実数になる演算子は，エルミート演算子となることも言える (練習問題 2.3.1)．

次に，演算子 $\hat{A}$ に対する固有値方程式

$$\hat{A}|\phi_a\rangle = a|\phi_a\rangle \tag{2.14}$$

を考える．一般に，$|\Phi\rangle = \hat{A}|\phi\rangle$ なら Ψ を任意の状態として $\langle\Psi|\Phi\rangle = \langle\Psi|\hat{A}|\phi\rangle$ となり，この複素共役 から $\langle\Phi|\Psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}^\dagger|\Psi\rangle$，即ち $\langle\Phi| = \langle\phi|\hat{A}^\dagger$ を得る．従って，(2.14) は

$$\langle\phi_a|\hat{A}^\dagger = a^*\langle\phi_a| \tag{2.15}$$

と同等になり，とくにエルミート演算子 $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ の場合は

$$\langle\phi_{a'}|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\phi_a\rangle = a^2\langle\phi_{a'}|\phi_a\rangle = a'^*a\langle\phi_{a'}|\phi_a\rangle \tag{2.16}$$

を得て，$a = a'$ と置いて固有値 a は実数に求まる．また固有値が実数であるなら，$a \neq a'$ $(a^2 \neq a'a)$ の下で固有状態は直交して $\langle\phi_{a'}|\phi_a\rangle = 0$ となる．とくに，$\{\phi_a\}$ が $\mathbb{H}$ の一次独立な基底（**完全系**）となる場合には，(2.14) の固有値は離散的な実数であり，改めて $|\phi_{a_n}\rangle \equiv |a_n\rangle, (n = 1, 2, \cdots)$ と書いて

$$\langle\phi_{a_n}|\phi_{a_m}\rangle = \langle a_n|a_m\rangle = \delta_{nm} \tag{2.17}$$

と規格化できる．このとき，任意の状態 $\psi(\in \mathcal{H})$ は

$$|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\psi_n, \ (\psi_n = \langle a_n|\psi\rangle) \tag{2.18}$$

$$= \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle \tag{2.19}$$

と展開されるが，ψ の任意性からこれを外した

$$1 = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| \tag{2.20}$$

の形式で，$\{|a_n\rangle\}$ の完全性を表すこともできる．

さて，展開 (2.19) は，量子力学の**確率解釈**と結び付いた重要な意味を持つ．

確率解釈（M. ボルン，1926）

$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ に規格化された状態 ψ の下で，$|\langle a_n|\psi\rangle|^2$ は物理量 $\hat{A}$ の観測値を a_n に見出す確率を表す．

従って，$\langle\psi|\psi\rangle = 1$ に規格化された状態は，何れかの a_n が見出される確率が 1 に規格化された状態である．(2.12) によれば，このような規格化は $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$ により時間に依存せず，**確率は保存する．**

さて，確率 1 に規格化された状態 ψ の下で，

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_n a_n |\langle a_n|\psi\rangle|^2 \cdots A \text{ の期待値}, \tag{2.21}$$

$$(\Delta A)^2 = \langle(\hat{A} - \langle A\rangle)^2\rangle = \langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2 \cdots A \text{ の分散}, \tag{2.22}$$

（ΔA 自身は A の標準偏差と呼ばれる）等々である．

定義より，固有状態は分散を 0 にする状態であり，逆に $\hat{A}$ の観測値が一つの値 a_n に見出されたときは，状態は固有状態 ϕ_{a_n} である（練習問題 2.3.3）．現実の観測結果に結び付く量子論的な分散は，行列要素と同様に，行列力学（ハイゼンベルク表示）と波動力学（シュレディンガー表示）の何れの立場で計算しても同一量となる．

このような分散の計算は，状態のノルムが有限であることを前提としているが，自由粒子の位置や運動量の演算子等は，連続的な固有値（観測値）に属する固有状態を持ち，そのノルムは発散して前提が満たされない．さらに，実数の連続固有値を持つエルミート演算子に (2.16) を適用すると，やはり固有状態の内積 $\langle\phi_a|\phi_{a'}\rangle$, $(a \neq a')$ は直交し，内積は $a = a'$ を除く至る所 0 となる．従って，$\langle\phi_a|\phi_{a'}\rangle$ は通常の関数としての意味を持たないが，離散固有値の規格化 (2.17) 因子 δ_{nm} の性質 $\sum_m \delta_{nm} f_m = f_n$ を連続変数に拡張した，

$$\delta_a[f] \equiv \int da' \delta(a - a') f(a') = f(a) \tag{2.23}$$

が表す，汎関数としての意味を持たせることはできる．$\delta(a - a')$ はディラックにより導入された (2.23) の汎関数に対応する分布関数の記号で，デルタ関数と呼ばれる．

以下では数学的な厳密性に立ち入らず，実数の連続固有値を持つエルミート演算子の固有状態 $|\phi_a\rangle \equiv |a\rangle$ に対しては，この記号を用いて

$$\langle\phi_a|\phi_{a'}\rangle = \langle a|a'\rangle = \delta(a - a') \tag{2.24}$$

と規格化する．このとき，(2.19) に対応して，$\langle\phi_a|\phi_{a'}\rangle$ が (2.23) の汎関数としての意味を持つ空間の任意状態 ψ を

$$|\psi\rangle = \int da |a\rangle \psi(a), \ (\ \psi(a) = \langle a|\psi\rangle\ ) \tag{2.25}$$

$$= \int da|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{2.26}$$

と展開できる．あるいは，(2.20) に対応して

$$1 = \int da|a\rangle\langle a| \tag{2.27}$$

と書くこともできる．現実には，遠方で 0 になるポテンシャルを持つハミルトニアン $\hat{H}$ のように，離散的な束縛状態の固有値と連続的な散乱状態の固有値が混在していることがある．そこで，一般的な状態の展開を

$$|\psi\rangle = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|\psi\rangle + \int da|a\rangle\langle a|\psi\rangle \tag{2.28}$$

と表し，右辺第 1 項の係数は規格化可能な状態空間の内積が与え，第 2 項の係数は連続スペクトルを表示する汎関数の値と考える．

以上は，一つの演算子 $\hat{A}$ の固有状態が完全系を張ると言う前提に立った状態の展開形式であるが，$\hat{A}$ と可換な別のエルミート演算子 $\hat{B}$, $(\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A})$ があれば，二つの演算子に共通の固有状態 $\hat{A}|\phi_{a,b}\rangle = a|\phi_{a,b}\rangle$, $\hat{B}|\phi_{a,b}\rangle = b|\phi_{a,b}\rangle$, $([\hat{A},\hat{B}]|\phi_{a,b}\rangle = 0)$ を矛盾なく設定でき，(2.17) あるいは (2.24) に従って規格化して基底とすることが可能である．さらに，交換可能なエルミート演算子が存在すればその固有値方程式も設定し，最終的に交換可能なエルミート演算子の最大の組 $\hat{A}, \hat{B}, \cdots, \hat{C}$ に対する共通の固有状態 $\hat{A}|\psi_{a,b,\cdots,c}\rangle = a|\psi_{a,b,\cdots}\rangle$, $\hat{B}|\psi_{a,b,\cdots,c}\rangle = b|\psi_{a,b,\cdots}\rangle$, $\cdots$, $\hat{C}|\psi_{a,b,\cdots,c}\rangle = c|\psi_{a,b,\cdots}\rangle$ を規格化したものが，考えている状態空間の基底となる．

練習問題 2.2.1

演算子のエルミート共役は，以下の性質を持つことを確かめよ．

1) $(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})^\dagger = \alpha^*\hat{A}^\dagger + \beta^*\hat{B}^\dagger$

2) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$

3) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$

解答 (2.13) の定義から，それぞれ以下のように確かめられる．

1) $\langle(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})\psi|\phi\rangle = \alpha^*\langle\hat{A}\psi|\phi\rangle + \beta^*\langle\hat{B}\psi|\phi\rangle$
$= \alpha^*\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle + \beta^*\langle\psi|\hat{B}^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|\alpha^*\hat{A}^\dagger|\phi\rangle + \langle\psi|\beta^*\hat{B}^\dagger|\phi\rangle$
$= \langle\psi|\alpha^*\hat{A}^\dagger + \beta^*\hat{B}^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|(\alpha\hat{A} + \beta\hat{B})^\dagger|\phi\rangle$,

2) $\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = (\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^*)^* = (\langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle)^* = \langle\psi|(\hat{A}^\dagger)^\dagger|\phi\rangle$,

3) $\langle\hat{A}\hat{B}\psi|\phi\rangle = \langle\hat{B}\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger|\phi\rangle = \langle\psi|(\hat{A}\hat{B})^\dagger|\phi\rangle$. □

補足

演算子 $\hat{A}$ が，ある定数 K により $\|\hat{A}\psi\| < K\|\psi\|$, $(\psi \in \mathcal{H})$ を満たすとき，演算子 $\hat{A}$ は有界であり $\mathcal{H}$ の中で定義されている．上の 1)〜3) は，演算子が有界な場合の形式的な計算である．量子力学で普通のように現れる非有界な演算子の場合は，エルミート共役の定義そのものを拡張しなくてはならないが（付録 C），多くの場合はその差を気にしなくてよい．

練習問題 2.2.2

ハミルトニアン演算子が $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q})$ で与えられる，1 次元の系を考える．ノルムが 1 に規格化されたシュレディンガー表示の状態 $\psi(t)$ の下で，位置演算子 $\hat{q}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の期待値の運動方程式を調べよ．

解答 時間に依存するシュレディンガー方程式を

$$\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad \frac{\partial}{\partial t}\langle\psi(t)| = -\frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|\hat{H}$$

と書き，$[\hat{p}^2, \hat{q}] = -2i\hbar\hat{p}$ および $[V(\hat{q}), \hat{p}] = i\hbar V(\hat{q})'$ に注意すると，

$$\frac{d}{dt}\langle q\rangle(t) = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[\hat{H}, \hat{q}]\psi(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle\psi(t)|\hat{p}|\psi(t)\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle(t),$$
$$\frac{d}{dt}\langle p\rangle(t) = \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|[\hat{H}, \hat{p}]\psi(t)\rangle = -\langle\psi(t)|V(\hat{q})'|\psi(t)\rangle = \langle V(q)'\rangle(t).$$

従って，両者を組み合わせると，ニュートンの運動方程式が期待値の意味で成立することを述べる**エーレンフェストの定理**

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle q\rangle(t) = -\langle V(q)'\rangle(t)$$

が導かれる．□

2.3 分散と不確定性関係

分散は，量子力学における観測の，際立った特徴を与える指標にもなっている．いま，交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}\ (\neq 0)$ を満たすエルミート演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対し，系の状態 ψ によるこれらの演算子の期待値をそれぞれ $\langle A\rangle$, $\langle B\rangle$ とし，自乗の期待値が分散となるエルミート演算子 $\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A\rangle$, $\Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B\rangle$ を定義する．

このとき，状態 $|\Psi\rangle = [\Delta\hat{A} + i\alpha\Delta\hat{B}]\psi\rangle$, $(\alpha :$ 実数$)$ を定義すると，$\hat{C}^\dagger = \hat{C}$ に注意して

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = (\Delta A)^2 + \alpha^2(\Delta B)^2 - \alpha\langle\hat{C}\rangle \geq 0 \tag{2.29}$$

が得られる．これを α に関する 2 次式に見立てると，その判別式の符号からケナード–ロバートソンの**不確定性関係**

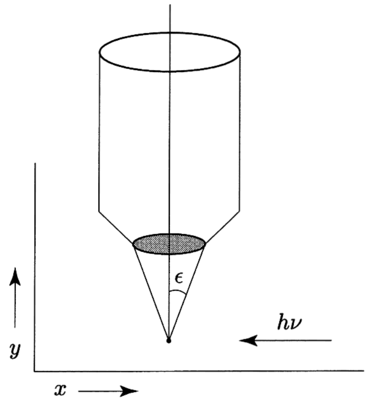


図 2.3　ハイゼンベルクの γ 線顕微鏡（文献 [17] より）：電子（黒点）にあたる光の波長が $\lambda = \frac{\nu}{c}$ であるとき，対物レンズ（灰色部）による電子の x 位置の光学的測定誤差は $\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin\epsilon}$ である．一方，この測定過程で光子（運動量 $\frac{h\nu}{c}$）が電子に与える運動量は既知ではないが，反跳後に光子がレンズに入ることから電子の x 方向の運動量に $\Delta p_x \sim \frac{h\nu}{c}\sin\epsilon$ 程度の不確定性が生じており，$\Delta x \Delta p_x \sim h$ と評価される．この思考実験では，光の粒子性と波動性の二重性が使われているものの，ボーアはこのような半古典的な評価は (2.31) に対応しないと反論した．

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle \hat{C}\rangle\right| = \frac{1}{2}\left|\langle\psi|[\hat{A},\hat{B}]|\psi\rangle\right| \tag{2.30}$$

が導かれる．ここで，とくに $\hat{A} = \hat{q}, \hat{B} = \hat{p}$，および $\hat{C} = \hbar$ と置いて得られる関係が，ハイゼンベルク（およびワイル）の不確定性関係

$$\boxed{\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{2.31}$$

である（図 2.3）．

この結果，$\Delta q, \Delta p$ を粒子の位置と運動量の測定に伴う観測値の誤差そのものであるとすると，位置と運動量の測定誤差は同時に 0 にすることができないという，古典物理の世界にはない際立った特性が現れたことになる．しかし，量子論的な分散を直接観測値の測定誤差に結び付けることができるかどうかは，自明ではない．また，純粋に量子論的な分散においても，(2.30) とは異なる評価を導くこともできる．

実際，1930 年にシュレディンガーはハイゼンベルクの不確定性関係をより一般的な立場から検証し，以下のような不等式を導いた．まず，必ずしも可換ではないエルミート演算子 $\hat{A}, \hat{B}$ に対し，このとき，$(\Delta A)^2 = \langle\psi|\Delta\hat{A}^2|\psi\rangle = \|\Delta\hat{A}\psi\|^2$, $\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle = \langle\Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\rangle^*$ 等に注意して，シュヴァルツの不等式より

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 = \|\Delta\hat{A}\psi\|^2\|\Delta\hat{B}\psi\|^2 \geq \left|\langle\Delta\hat{A}\psi|\Delta\hat{B}\psi\rangle\right|^2 = \left|\langle\Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\left|\langle \Delta\hat{A}\Delta\hat{B}\rangle\right|^2 + \left|\langle \Delta\hat{B}\Delta\hat{A}\rangle\right|^2\right\}. \tag{2.32}$$

ここで，反交換関係の記号 $\{a,b\} = ab + ba$ を用いた積の分解

$$\Delta\hat{A}\Delta\hat{B} = \frac{1}{2}\{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\} + \frac{1}{2}[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}]$$

を (2.32) の右辺に代入すると，不等式

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \Delta(A,B) + \frac{1}{4}\left|\langle [\hat{A}, \hat{B}]\rangle\right|^2 \tag{2.33}$$

が導かれる．ここで，$\Delta(A,B)$ は物理量 A, B の**共分散**と呼ばれ

$$\Delta(A,B) = \frac{1}{4}\left|\langle \{\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}\}\rangle\right|^2 = \left(\frac{\langle \{\hat{A}, \hat{B}\}\rangle}{2} - \langle A\rangle\langle B\rangle\right)^2 \tag{2.34}$$

で定義される．シュレディンガーの不等式が与える不確定性関係は，考えている状態の下で非可換な物理量の共分散が 0 のときケナード-ロバートソンの不確定性関係に帰着し，この意味でより適用範囲の広い不等式になっている．

現実の観測における測定誤差には，この様な量子論的な分散に加えて測定機器から生じる誤差や，A の測定機器が B の測定に及ぼす乱れも含まれるはずで，これを考慮すると不確定性関係の形は (2.31) から修正を受けることになる．そこで，状態 ψ の下で導かれる純粋に量子論的な観測値の不確定性を改めて $\Delta A = \sigma(A), \Delta B = \sigma(B)$ のように書くことにし，また A の測定器 O_A の出力の標準偏差を $\epsilon(A)$，測定器 O_A により B の測定値にもたらされる擾乱を $\eta(B)$ とするなら，$\sigma(A), \sigma(B), \epsilon(A)$ および $\eta(B)$ の何らかの関係が，現実的な不確定性関係となるはずである．一例をあげると，

$$\epsilon(A)\eta(B) + \epsilon(A)\sigma(B) + \sigma(A)\eta(B) \geq \frac{1}{2}|\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle| \tag{2.35}$$

は 2003 年に小澤により提唱された不等式で[18],[19]，不確定関係に新しい視点をもたらし，その後のこの分野における発展を促した．このような意味での不確定性関係の本質を確立してゆくことは，量子論の現代的で重要な課題の一つとなっている[20]．

練習問題 2.3.1

任意の状態による対角要素が実数になる演算子は，エルミート演算子であることを確かめよ．

解答 任意の状態 ϕ, ψ の和を $\Phi = \phi + \psi$ とする．このとき，$\hat{A}$ の対角要素が全て実数であるとすれば，

$$\underbrace{(\hat{A})_{\Phi\Phi}}_{\text{実数}} = \langle\phi+\psi|\hat{A}|\phi+\psi\rangle = \underbrace{(\hat{A})_{\phi\phi}}_{\text{実数}} + \underbrace{(\hat{A})_{\psi\psi}}_{\text{実数}} + \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle\,.$$

右辺が実数であるためには $\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle = \langle\phi|\hat{A}|\psi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}^\dagger|\phi\rangle$ であればよい．

従って ϕ, ψ の任意性より，$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ でなくてはならない．□

練習問題 2.3.2

エルミート演算子の異なる固有値に属する固有状態 $\phi_\lambda, \phi_{\lambda'} (\lambda \neq \lambda')$ が，直交することを確かめよ．

解答 $\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle = e^{i\theta} |\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle|$，および $\Phi = \phi_\lambda + ie^{-i\theta}\phi_{\lambda'}$ と置くと，

$$(\hat{A})_{\Phi\Phi} = \lambda \langle \phi_\lambda | \phi_\lambda \rangle + \lambda' \langle \phi_{\lambda'} | \phi_{\lambda'} \rangle + i(\lambda' - \lambda) |\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle|.$$

従って，左辺に合わせて右辺も実数であることから，$\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle = 0, (\lambda \neq \lambda')$ が導かれる．□

練習問題 2.3.3

エルミート演算子 $\hat{A}$ の分散 ΔA^2 が 0 になる（規格化可能な）状態は，固有状態であることを確かめよ．

解答 $\hat{A}$ のエルミート性に注意すると，分散が 0 であるなら，

$$(\Delta A)^2 = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \|(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi\|^2 = 0$$

が成立する．従って $(\hat{A} - \langle A \rangle)\psi = 0$ を得て，ψ は固有値 $\langle A \rangle$ に属する $\hat{A}$ の固有状態になっている．このとき，$\langle A \rangle$ は固有値 $\{a_n\}$ の何れかに一致しているから，状態 ψ は対応する $\{\phi_{a_n}\}$ の何れかになっている．□

練習問題 2.3.4

シュヴァルツの不等式 $\|\phi_1\|^2 \|\phi_2\|^2 \geq |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2$ を確かめよ．

解答 $\|\phi_2\| \neq 0$ として $a = \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle / \|\phi_2\|^2$ と置くと，

$$\begin{aligned}\|\phi_2\|^2 \|\phi_1 - a\phi_2\|^2 &= \|\phi_2\|^2 \left\{ \|\phi_1\|^2 + |a|^2 \|\phi_2\|^2 - (a\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle + a^* \langle \phi_2 | \phi_1 \rangle) \right\} \\ &= \|\phi_1\|^2 \|\phi_2\|^2 - |\langle \phi_1 | \phi_2 \rangle|^2 \geq 0 . \quad \square\end{aligned}$$

練習問題 2.3.5

物理量 A の測定誤差 $\epsilon(A)$ と，A の測定に伴って共役な物理量 B が受ける擾乱 $\eta(B)$ を量子論に組み込む考え方は一通りではない．仮に，このような測定の下での実測値を導く演算子が $\hat{A}' = \hat{A} + \delta_\epsilon(\hat{A}), \hat{B}' = \hat{B} + \delta_\eta(\hat{B})$ と書け，測定に依存する演算子の分散が $\Delta\delta_\epsilon(A) = \epsilon(A), \Delta\delta_\eta(B) = \eta(B)$ であるとする．このとき，$\hat{A}', \hat{B}'$ は共役ではなく $[\hat{A}', \hat{B}'] = 0$ であるとして[21]，$\sigma(A), \sigma(B), \epsilon(A), \eta(B)$ が満たす関係を調べよ．

解答

$$0 = [\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \delta_\eta(\hat{B})] + [\delta_\epsilon(\hat{A}), \hat{B}] + [\delta_\epsilon(\hat{A}), \delta_\eta(\hat{B})].$$

従って，ケナード-ロバートソンの不確定性関係を考慮して，

$$
\begin{aligned}
|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle_\psi| &= |\langle\,[\hat{A},\delta_\eta(\hat{B})]+[\delta_\epsilon(\hat{A}),\hat{B}]+[\delta_\epsilon(\hat{A}),\delta_\eta(\hat{B})]\,\rangle_\psi| \\
&\le |\langle[\hat{A},\delta_\eta(\hat{B})]\rangle_\psi|+|\langle[\delta_\epsilon(\hat{A}),\hat{B}]\rangle_\psi|+|\langle[\delta_\epsilon(\hat{A}),\delta_\eta(\hat{B})]\rangle_\psi| \\
&\le 2\,\{\,\sigma(A)\eta(B)+\epsilon(A)\sigma(B)+\epsilon(A)\eta(B)\,\}
\end{aligned}
$$

となる．得られた結果は，小澤の不等式に他ならない．□

2.4 シュレディンガー方程式と波動関数の表示

状態の表示という用語は，演算子や状態の時間依存性を表すハイゼンベルク表示，あるいはシュレディンガー表示とは別に，以下のような使い方もされる．いま，1 自由度の系を考え，その位置の演算子 $\hat{q}\,(=\hat{q}^\dagger)$ の固有状態を

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle\,, \tag{2.36}$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')\,, \tag{2.37}$$

および，完全性

$$1 = \int dq|q\rangle\langle q| \tag{2.38}$$

で定義する．ここで演算子 $\hat{q}$ が実軸全体に亘る連続固有値を持つことは，正準交換関係の帰結である．実際，状態 $|q\rangle$ に λ を実数とするユニタリ変換 $e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}$ を作用して得られる状態は，$e^{\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}} = \hat{q}+\lambda$ に注意して

$$\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}|q\rangle = (q+\lambda)e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}|q\rangle \tag{2.39}$$

を満たし，$e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda\hat{p}}|q\rangle = |q+\lambda\rangle$ となる．λ は任意の実数であるから，(2.36) の固有値は実軸全体を亘る*5)．

こうして (2.38) の完全性により，任意の状態の内積は

$$\langle\phi|\psi\rangle = \int dq\langle\phi|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \int dq\phi(q)^*\psi(q), \tag{2.40}$$

$$(\,\phi(q)=\langle q|\phi\rangle,\,\psi(q)=\langle q|\psi\rangle\,) \tag{2.41}$$

と表され，引数 q を持つ関数の内積となる．このような状態 $\phi(q),\psi(q)$ 等を **q-表示**の状態と呼ぶ．この意味で，(2.18), (2.25) の $\psi_n,\psi(a)$ は，（固有値の離散的と連続的を問わず）a-表示の状態と言うことになる．とくに，状態の規格化 $\|\psi\|^2=1$（全確率 $=1$）を q-表示で書き下すと，

$$\text{全確率：}1 = \langle\psi|\psi\rangle = \int \underbrace{dq|\psi(q)|^2}_{\text{粒子を }dq\text{ に見出す確率}} \tag{2.42}$$

となり，$|\psi(q)|^2$ が粒子位置の（存在）確率密度の意味を持つ．

---

*5) この意味で，正準交換関係を満たすエルミート演算子は，非有界な演算子である．

さて，q-表示の状態に対し

$$\langle q|\hat{q}|\psi\rangle = q\psi(q)\,, \tag{2.43}$$

$$\langle q|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\psi(q) \tag{2.44}$$

が確かめられる（練習問題 2.4.1）.

この表示は，位置ベクトルが $\boldsymbol{r}$ の 3 次元空間の粒子に対して，$\hat{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r}$, $\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla$ である．そこで，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の下にある質量 m の非相対論的粒子に対しては，系のハミルトニアンは $H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2 + V(\boldsymbol{r})$ であり，$\boldsymbol{r}$-表示における時間に依存しないシュレディンガー方程式 (2.7) は，歴史的にシュレディンガーが最初に書き下した形

$$\boxed{\left\{\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\nabla\right)^2 + V(\boldsymbol{r})\right\}\psi_E(\boldsymbol{r}) = E\psi_E(\boldsymbol{r})} \tag{2.45}$$

となる．この定常状態の解が，離散的な固有値 $\{E_n\}$ に属する固有状態となって正規直交完全系を構成するなら，(2.6) の状態ベクトルは $|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|\psi_n\rangle c_n$ と展開され，その $\boldsymbol{r}$-表示は

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\psi_{E_n}(\boldsymbol{r}), \quad (\,c_n = \langle\psi_{E_n}|\psi\rangle\,) \tag{2.46}$$

の形となる．このとき $|c_n|^2$ は，規格化された状態 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の下でエネルギーが E_n に見出される確率となる．

既に述べたように状態が時間に依存する $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の場合でも全確率は保存して 1 のままであるが，確率密度 $\rho(\boldsymbol{r},t) = |\psi(\boldsymbol{r},t)|^2 = \langle\psi(t)|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle$ は時間に依存する．実際，$\langle\boldsymbol{r}|\hat{\boldsymbol{p}}^2|\psi\rangle = -\hbar^2\nabla^2\langle\boldsymbol{r}|\psi\rangle, \langle\psi|\hat{\boldsymbol{p}}^2|\boldsymbol{r}\rangle = -\hbar^2\nabla\langle\psi|\boldsymbol{r}\rangle$, および $V(\boldsymbol{r})|\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}| = |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|V(\boldsymbol{r})$ に注意すると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{r},t) &= \frac{i}{\hbar}\langle\psi(t)|\left[\hat{H}, |\boldsymbol{r}\rangle\langle\boldsymbol{r}|\right]|\psi(t)\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2mi}\left[\left\{\nabla^2\langle\psi(t)|\boldsymbol{r}\rangle\right\}\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle - \langle\psi(t)|\boldsymbol{r}\rangle\left\{\nabla^2\langle\boldsymbol{r}|\psi(t)\rangle\right\}\right] \\ &= -\nabla\cdot\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t),\end{aligned} \tag{2.47}$$

ただし，

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left\{\psi(\boldsymbol{r},t)^*\nabla\psi(\boldsymbol{r},t) - \left(\nabla\psi^*(\boldsymbol{r},t)\right)\psi(\boldsymbol{r},t)\right\} \tag{2.48}$$

が導かれる．(2.47) は確率分布に対する**連続の方程式**であり，$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ は**確率の流れの密度**と呼ばれる．$\rho(\boldsymbol{r},t)$, $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r},t)$ 等は，状態のノルムが発散して定義できない場合でも，意味のある物理量を与える．

正準変数 (q,p) の系に戻り，q-表示と同様に運動量演算子 $\hat{p}$ の固有状態

$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle\,, \tag{2.49}$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p'), \tag{2.50}$$

とその完全性 $1=\int dp|p\rangle\langle p|$ を基に，p-表示の状態 $\tilde{\psi}(p)=\langle p|\psi\rangle$ を構成する．このとき，q-表示と同様の議論から，

$$\langle p|\hat{p}|\psi\rangle = p\tilde{\psi}(p), \tag{2.51}$$

$$\langle q|\hat{p}|\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\tilde{\psi}(p) \tag{2.52}$$

が確かめられる．表示の異なる $\psi(q)$ と $\tilde{\psi}(p)$ の関係は，方程式

$$\langle q|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\langle q|p\rangle = p\langle q|p\rangle \tag{2.53}$$

を満たす**変換関数** $\langle q|p\rangle$ から求められる．まず，この方程式から

$$\langle q|p\rangle = Ce^{\frac{i}{\hbar}pq}, \quad (C:\text{定数}).$$

そこで，δ-関数 $\lim_{\epsilon\to+0}\langle q|e^{-\epsilon\hat{p}^2}|q'\rangle=\delta(q-q')$ の性質 (2.23) を考慮して，ガウス積分[*6)] を繰り返すと，

$$\begin{aligned}
1 &= \lim_{\epsilon\to+0}\int dq'\langle q|e^{-\epsilon\hat{p}^2}|q'\rangle = \lim_{\epsilon\to+0}\int dq'|C|^2\int dpe^{-\epsilon p^2+\frac{i}{\hbar}p(q-q')} \\
&= \lim_{\epsilon\to+0}|C|^2\sqrt{\frac{\pi}{\epsilon}}\int dq'e^{-\frac{1}{4\epsilon\hbar^2}(q-q')^2} = \lim_{\epsilon\to 0}|C|^2\sqrt{\frac{\pi}{\epsilon}}\sqrt{4\pi\epsilon\hbar^2} \\
&= 2\pi\hbar|C|^2.
\end{aligned}$$

従って，$C=1/\sqrt{2\pi\hbar}$ を得て，変換関数の具体的な形が

$$\boxed{\langle q|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}pq}} \tag{2.54}$$

と決定される．(2.54) から，$\psi(q)$, $\tilde{\psi}(p)$ の関係がフーリエ変換と逆変換の関係

$$\psi(q) = \int dp\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle = \int\frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}pq}\tilde{\psi}(p), \tag{2.55}$$

$$\tilde{\psi}(p) = \int dq\langle p|q\rangle\langle q|\psi\rangle = \int\frac{dq}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}pq}\psi(q) \tag{2.56}$$

となる．変換関数から，よく使われる δ-関数の積分表示

$$\boxed{\delta(q-q') = \int dp\langle q|p\rangle\langle p|q\prime\rangle = \int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(q-q')}} \tag{2.57}$$

$(k=p/\hbar)$ も導かれる．

練習問題 2.4.1

q-表示の状態に対し，$\hat{q},\hat{p}$ の作用が (2.43), (2.44) になることを確かめよ．

---

*6) $\int dxe^{-ax^2+bx}=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{4a}}$, $(a>0)$.

解答 (2.15) をエルミート演算子 $\hat{q}$ に適用すれば，(2.43) は明らかである．また，(2.39) の $e^{-\frac{i\lambda}{\hbar}\hat{p}}|q\rangle = |q+\lambda\rangle$ に注意すると，

$$\langle q|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle q|e^{\frac{i\lambda}{\hbar}\hat{p}}|\psi\rangle\bigg|_{\lambda=0} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle q+\lambda|\psi\rangle\bigg|_{\lambda=0}$$
$$= -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\langle q|\psi\rangle\,. \quad \square$$

練習問題 2.4.2

q-表示の位置と運動量演算子を改めて $\hat{q} = q$, $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}$ と書くとき，q-表示の状態 $\psi(q)$ に対し $[\hat{p}, \hat{q}]\psi(q) = -i\hbar\psi(q)$ の意味で，正準交換関係が成立することを確かめよ．

解答 $\hat{p}\hat{q}\psi(q) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial q}(q\psi(q)) = -i\hbar\psi(q) + q\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\psi(q)\right) = -i\hbar\psi(q) + \hat{q}\hat{p}\psi(q)$．上式の最右辺第 2 項を左辺に移した形が，求める正準交換関係に他ならない．$\square$

練習問題 2.4.3

q-表示の位置と運動量演算子が，波動関数の内積 $\langle\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)^*\phi(q)$ の下で，エルミート演算子の条件を満たすことを確かめよ．

解答 内積は有限で，波動関数は遠方で十分速く 0 になるとする．このとき，

$$\langle\hat{q}\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq(q\psi(q))^*\phi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)^*(q\phi(q)) = \langle\psi|\hat{q}\phi\rangle$$

から，$\hat{q}$ のエルミート性は明らか．また，

$$\langle\hat{p}\psi|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dq\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\psi(q)\right)^*\phi(q)$$
$$= i\hbar\left[\psi(q)^*\phi(q)\right]_{-\infty}^{\infty} + \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\phi(q)\right)$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} dq\psi(q)^*\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial q}\phi(q)\right) = \langle\psi|\hat{p}\phi\rangle$$

より，$\hat{p}$ のエルミート性も確かめられる．$\square$

練習問題 2.4.4

δ-関数の積分表示 (2.57) は形式的なもので，関数としては至る所 0 である．そこで，k-積分に $e^{-\epsilon k^2}$ あるいは $e^{-\epsilon|k|}$ の重みを付けて積分結果を通常の関数に帰着させ，その $\epsilon \to +0$ の極限として δ-関数を表現せよ．

解答 重みを付けた積分は，それぞれ

$$\delta(q-q') = \lim_{\epsilon\to+0}\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(q-q')-\epsilon k^2} = \lim_{\epsilon\to+0}\sqrt{\frac{1}{4\pi\epsilon}}e^{-\frac{1}{4\epsilon}(q-q')^2},$$
$$\delta(q-q') = \lim_{\epsilon\to+0}\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(q-q')-\epsilon|k|}$$

$$= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{1}{(q-q') + i\epsilon} - \frac{1}{(q-q') - i\epsilon} \right\}$$
$$= \lim_{\epsilon \to +0} \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(q-q')^2 + \epsilon^2}$$

となる．2 番目の表式は，δ-関数の定義 (2.23) を複素関数のコーシーの積分公式に対応させ，複素平面上の積分路から実軸への極限をとった形式になっている．□

2.5 密度演算子（行列）

ディラックのブラ・ケット記法を用いると，任意の状態 ψ, ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$) による演算子 $\hat{A}$ の期待値は，

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \mathrm{tr}\left(|\psi\rangle\langle\psi|\hat{A}\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_\psi \hat{A}\right), \tag{2.58}$$

ただし，

$$\hat{\rho}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi| \quad (= \hat{\rho}_\psi^\dagger) \tag{2.59}$$

と書くことができる．演算子 $\hat{\rho}_\psi$ は，状態 ψ の別表現とも言える演算子で，**純粋状態の密度演算子**と呼ばれる．定義により，純粋状態の密度演算子は

$$\hat{\rho}_\psi^2 = \hat{\rho}_\psi, \qquad \mathrm{tr}(\hat{\rho}_\psi) = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{2.60}$$

を満たす．(2.60) は，純粋状態の密度演算子の定義と考えてもよく，これより $\mathrm{tr}(\hat{\rho}_\psi^2) = 1$ が導かれる．また，意味が明確であれば，添字の ψ を省略しても構わない．いま，物理量 A に対応するエルミート演算子 $\hat{A}$ の固有状態 $\hat{A}|\phi_i\rangle = a_i|\phi_i\rangle$, ($\langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$) が状態空間の完全系をなし，状態 ψ が

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |\phi_i\rangle, \quad \left(\sum_i |c_i|^2 = 1\right) \tag{2.61}$$

と展開できるとする．このとき，密度演算子 (2.60) の行列要素は非対角形で

$$(\hat{\rho}_\psi)_{ij} = c_i c_j^* \tag{2.62}$$

の構造を持ち，状態 ψ の位相の情報を含んだ，観測により状態の変化が生じる以前の量子論的な行列となっている．

ここで，物理量 A の観測を行い，確率 $|c_i|^2$ で固有値 a_i が見出されたとすれば，観測に伴い状態は $\psi \to \phi_i$ と変化する．観測後の状態は，射影演算子 $\hat{\Pi}_i \equiv |\phi_i\rangle\langle\phi_i|$ ($\hat{\Pi}_i^\dagger = \hat{\Pi}_i$, $\hat{\Pi}_i^2 = \hat{\Pi}_i$) により $\hat{\Pi}_i|\psi\rangle = c_i|\phi_i\rangle$ の意味で取り出せる．そこで観測の過程は，密度演算子の言葉で $\hat{\rho}_\psi$ から

$$\hat{\rho}'_\psi = \sum_i \Pi_i \hat{\rho}_\psi \Pi_i = \sum_i p_i |\phi_i\rangle\langle\phi_i|, \; (p_i = |c_i|^2) \tag{2.63}$$

への変化と言うことができる．演算子 $\hat{\rho}'_\psi$ は (2.60) と類似の構造を持ち，$\mathrm{tr}\,\hat{\rho}'_\psi = 1$ を満たすが，一般には $\hat{\rho}'^2_\psi \neq \hat{\rho}'_\psi$ である．また，行列要素は $(\hat{\rho}')_{ij} = p_i\delta_{ij}$ と対角形で，状態 ψ の位相の情報は残されていない．従って (2.63) は，純粋状態の密度演算子 $\hat{\rho}_{\phi_i}$ を古典的な重み p_i で混合したもので，**混合状態の密度演算子**の例となっている．混合状態の密度演算子 $\hat{\rho}'$ を規定する条件は $\mathrm{tr}(\hat{\rho}) = 1$, $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ であり，これを (2.63) の形に表した際の p_i は，波動関数由来でなくともよい．

例として，電子のスピン演算子 ($\hbar$ 単位) を考える (付録 D.3)．いま，3 軸方向のスピン演算子 $S_3 = \frac{1}{2}\sigma_3$ の固有値 $\pm\frac{1}{2}$ に属する固有状態を $|(\pm)_3\rangle = |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle$ と書くと，1 軸方向のスピン演算子 $S_1 = \frac{1}{2}\sigma_1$ の固有値 $\frac{1}{2}$ に属する規格化された固有状態は，

$$|(+)_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(|(+)_3\rangle + |(-)_3\rangle\big) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} \tag{2.64}$$

と書け，対応する純粋状態の密度演算子は

$$\hat{\rho}_{(+)1} = |(+)_1\rangle\langle(+)_1| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix} \tag{2.65}$$

となる．次に，(2.63) の混合状態の密度演算子は

$$\hat{\rho}'_{(+)1} = p_1|(+)_3\rangle\langle(+)_3| + p_2|(-)_3\rangle\langle(-)_3| = \begin{pmatrix}p_1 & 0\\0 & p_2\end{pmatrix} \tag{2.66}$$

である．従って，純粋状態では $\mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{(+)1}S_1\right) = \frac{1}{2}$, $\mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{(+)1}S_2\right) = \mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{(+)1}S_3\right) = 0$ となり，S_1 の観測では確率 1 で $\frac{1}{2}$ の値が見出されるが，S_2, S_3 は等確率で $\pm\frac{1}{2}$ が見出される．一方，(2.66) の混合状態では，p_i が $|+\rangle_1$ 由来で $p_i = \frac{1}{2}$ なら，$\hat{\rho}'_{(+)1} \propto$ (単位行列) のため $\mathrm{tr}\left(\hat{\rho}_{(+)1}S_i\right) = 0$, $(i = 1, 2, 3)$ となり，どの S_i も等確率で $\pm\frac{1}{2}$ が見出される．

混合状態の密度演算子の手法は，量子系の統計集団に応用することもできる．いま，ある量子系の複製からなる集団が，環境体の中の統計集団としての部分系をなす場合を考える．部分系が環境体との緩やかな相互作用で温度 T の正準集団を構成し，ϕ_i が $\hat{H}$ をハミルトニアン演算子とする量子系のエネルギーの固有状態 $\hat{H}|\phi_i\rangle = E_i|\phi_i\rangle$ であるなら，統計集団としての平均エネルギーは ($\beta = \frac{1}{kT}$; k: ボルツマン定数)

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i| = \frac{e^{-\beta\hat{H}}}{\mathrm{tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right)}, \quad \left(w_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_k e^{-\beta E_k}}\right) \tag{2.67}$$

を密度演算子として

$$\bar{E} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{H}) = \sum_i w_i E_i, \quad \left(\sum_i w_i = 1\right) \tag{2.68}$$

と表せる．この場合の w_i は，波動関数由来のものではなく，統計集団の構造から決まるものである．また，正準集団のエントロピーが $S=-k\sum_i w_i\log w_i$ と書けることから*7)，$\hat{\rho}|\phi_i\rangle = w_i|\phi_i\rangle$ に注意して系のエントロピーを混合状態の密度演算子を使って $S=-k\,\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\log\hat{\rho}$ と表すことができる．

この結果は，正準統計集団を離れて密度演算子とエントロピーを結び付ける手段を与える．このようなエントロピーは，必ずしも熱と結び付ける必要が無く，改めて $k=1$ とおいて，フォン・ノイマン・エントロピーと呼ばれる

$$S \equiv -\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\log\hat{\rho} \tag{2.69}$$

が定義できる．(2.69) の特徴的な性質は，$\hat{\rho}(\hat{\rho}-1)=0$ を満たす純粋状態の密度演算子に対し，$S=-\mathrm{tr}\,\hat{\rho}\log\{(\hat{\rho}-1)+1\}=0$ となることである．一方，混合状態の (2.63) に対しては，$S=-\sum_i p_i\log p_i\,(\neq 0)$ となる．このようなフォン・ノイマン・エントロピーの性質は，状態空間 $\mathbb{H}_A\otimes\mathbb{H}_B$ を持つ殆ど独立な二つの量子力学系 A, B の合成系 (AB) 系の選択的な観測の問題に，興味深い視点をもたらす．

いま，合成系の規格化された状態を $|\Psi_{AB}\rangle$ とすれば，合成系としての純粋状態の密度演算子は $\hat{\rho}_{AB}=|\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|$ であり，$S_{AB}=-\mathrm{tr}\,\hat{\rho}_{AB}\log\hat{\rho}_{AB}=0$ となる．しかし，観測が B 系の状態には注目せず A 系に対してのみ行われる場合には，A 系の密度演算子 $\hat{\rho}_A=\mathrm{tr}_B\,\hat{\rho}_{AB}$ から観測の情報を引き出すことができ，このときの A 系のエントロピー

$$S_A = -\mathrm{tr}_B\,\hat{\rho}_{AB}\log\hat{\rho}_{AB} \tag{2.70}$$

は，必ずしも 0 にはならない．(2.70) は，以下に見られるように，A, B 系にどの程度量子論的な**もつれ合い（エンタングルメント）**があるかを知る指標となり，エンタングルメント・エントロピーと呼ばれる．

例として，A, B が (2.64) のスピン $\frac{1}{2}$ 系で，合成系の状態が

$$\begin{aligned}|\Psi_{AB}\rangle &= |(+)_1\rangle_A\otimes|(+)_1\rangle_B \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|(+)_3\rangle_A+|(-)_3\rangle_A\right)\otimes\frac{1}{\sqrt{2}}\left(|(+)_3\rangle_B+|(-)_3\rangle_B\right)\end{aligned} \tag{2.71}$$

であるとしよう．この状態は A, B 系の状態の完全な直積で，A, B のスピン状態に量子論的なもつれ合いはない．このとき，

$$\hat{\rho}_A = \mathrm{tr}_B\Big\{|\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|\Big\} = |(+)_1\rangle_A\langle(+)_1|_A \tag{2.72}$$

*7) 正準集団に対する分配関数の表式 $Z(\beta)=\sum_i e^{-\beta E_i}\equiv e^{-\beta F}$ から，ヘルムホルツの自由エネルギーが $F=-\frac{1}{\beta}\log Z(\beta)$ と定義される．このとき，

$$S=-k\sum_i w_i\log\left(\frac{e^{-\beta E_i}}{Z(\beta)}\right)=-k\sum_i w_i\left\{-\beta E_i-\log Z(\beta)\right\}=\frac{\bar{E}-F}{T}$$

を得て，S は熱力学的なエントロピーの定義に帰着する．

であり，結果は A 系の純粋状態の密度演算子で，$S_A=0$ となる．次に，合成系の状態が

$$|\Psi_{AB}\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}\Big\{|(+)_3\rangle_A\otimes|(-)_3\rangle_B+|(-)_3\rangle_A\otimes|(+)_3\rangle_B\Big\} \tag{2.73}$$

であるとしよう．この場合，A, B 系のスピンの 3 軸方向の $\pm\frac{1}{2}$ 成分に相関があり，状態には量子論的なもつれ合いが生じている．この形から，A 系の密度演算子とエンタングルメント・エントロピーは，それぞれ

$$\hat{\rho}_A=\langle(+)_3|_B\hat{\rho}_{AB}|(+)_3\rangle_B+\langle(-)_3|_B\hat{\rho}_{AB}|(-)_3\rangle_B \tag{2.74}$$

$$=\frac{1}{2}\Big\{|(-)_3\rangle_A\langle(-)_3|_A+|(+)_3\rangle_A\langle(+)_3|_A\Big\}=\frac{1}{2}\mathbf{1}, \tag{2.75}$$

$$S_A=-\mathrm{tr}\left(\frac{1}{2}\mathbf{1}\right)\log\left(\frac{1}{2}\mathbf{1}\right)=\log 2 \tag{2.76}$$

となる．従って，A, B 系の量子論的もつれ合いの結果として，エンタングルメント・エントロピーに差が現れている．エンタングルメント・エントロピーは量子測定に関わる量子物理の様々な理論・実験分野で，現代的で有用な視点を与えている．

練習問題 2.5.1

(2.63) において，$\hat{\rho}'^2_\psi=\hat{\rho}'_\psi$ が満たされる場合の p_i の構造を調べよ．

解答 定義から $\hat{\rho}'^2_\psi=\sum_i p_i^2|\phi_i\rangle\langle\phi_i|=\hat{\rho}'_\psi=\sum_i p_i|\phi_i\rangle\langle\phi_i|$. したがって，$p_i(p_i-1)=0$ となり，$p_i=0,1$ および $\sum_i p_i=1$ から何れかの k で $p_k=1$ で他は $p_i=0,(i\neq k)$ でなくてはならず，その場合の $\hat{\rho}'_\psi$ は，$\hat{\rho}'_\psi=|\phi_k\rangle\langle\phi_k|$ 型の純粋状態の密度演算子に帰着する．□

2.6 代表的な基本問題

前節まで述べられた量子力学の枠組みを，q-表示のシュレディンガー波動関数を解くと言う立場から，基本的な幾つかの問題に適用する．問題は，簡単な順に並べているように見えるが，行列力学などの別の立場からすると，必ずしも簡単な順にはならない．なお，正準変数の表記は，3 次元の問題にも適用することを意識して，1 次元では (x,p)，3 次元では $(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ とする．

2.6.1 自由粒子

1 次元自由粒子のハミルトニアンは，粒子質量を mとして$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2$ である．従って，ハミルトニアンの固有値 E に属する固有状態を $\psi_E(x)=\langle x|\psi_E\rangle$ とすると，時間に依存しないシュレディンガー方程式は

$$\langle x|\big[\hat{H}-E\big]|\psi_E\rangle=\left[\frac{1}{2m}(-i\hbar\partial_x)^2-E\right]\psi_E(x)=0, \tag{2.77}$$

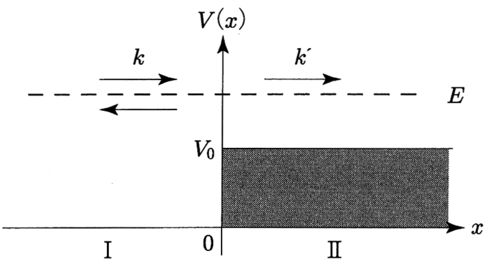


図 2.4　階段型ポテンシャルによる波の散乱：正方向に進む波数 k の波が，$x>0$ に存在するポテンシャル $V_0(=\text{const.})$ により，一部は反射率 R で反射され，一部は透過率 T で透過する．

あるいは

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) = -k^2\psi_E(x), \quad \left(|k| = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\right) \tag{2.78}$$

となり，ψ_E は k を波数とする平面波

$$\psi_k(x) = Ne^{ikx}, \ (N = \text{const.}) \tag{2.79}$$

の線形結合 $\psi_E = C_{(+)}\psi_{|k|} + C_{(-)}\psi_{-|k|}$, ($C_{(\pm)}$：定数) の形に求まる．

平面波解 (2.79) は，$N = 1/\sqrt{2\pi}$ にとると (2.57) より規格化 $\langle\psi_k|\psi_{k'}\rangle = \delta(k-k')$ を満たす．この解は，物理的意味の明快な解ではあるが，状態のノルム $\sqrt{\langle\psi_k|\psi_k\rangle}$ は発散して $\psi_k \notin \mathbb{H}$ である．しかし，確率密度 $\rho_k \equiv |\psi_k(x)|^2 = N^2$ は自由粒子の特徴を反映し，R_1, R_2 を x-軸上の区間とすれば，それぞれの区間に粒子が存在する相対確率は区間の長さ $|R_1|, |R_2|$ の比 $\int_{R_1} dx\rho_k / \int_{R_2} dx\rho_k = |R_1|/|R_2|$ を与える．さらに，$\psi_k(x)$ による確率の流れの密度は，

$$J_k(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi_k^*(x)\frac{\partial}{\partial x}\psi_k(x) - c.c\right) \tag{2.80}$$

$$= N^2 \times \frac{\hbar k}{m} = \rho_k v, \quad \left(v = \frac{\hbar k}{m}\right) \tag{2.81}$$

となり（$c.c$：複素共役項），古典的粒子の流れに対応させれば，速度 v の粒子が x-軸上の各点を単位時間当たり $\rho_k v$ 個通過する規格化になっている．

次に，やはり平面波解を導くが，位置の情報を持つ階段型のポテンシャル

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x<0), \\ V_0 & (x \geq 0) \end{cases} \tag{2.82}$$

の問題を考える．いま，$x<0$ から x-軸正方向に伝播した平面波が，ポテンシャルの段差の影響を受けて一部は反射され，一部は $x>0$ 方向に透過する場合を考える（図 2.4）．この粒子のエネルギーが $E\,(>V_0)$ であるとすると，領域 I $(x<0)$ と領域 II $(x \geq 0)$ における平面波の波数は，

$$\text{I}:\quad \hat{H}e^{ikx} = \frac{(\hbar k)^2}{2m}e^{ikx} = Ee^{ikx}, \tag{2.83}$$

$$\text{II}:\quad \hat{H}e^{ik'} = \left\{\frac{(\hbar k')^2}{2m} + V_0\right\}e^{ik'} = Ee^{ik'} \tag{2.84}$$

から決まる．従って，$x < 0$ から入射する粒子の平面波を $e^{ikx}, (k > 0)$ とすれば*8)，それぞれの領域における状態の形は

$$\Psi_{\text{I}}(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} \qquad \left(k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}\right), \tag{2.85}$$

$$\Psi_{\text{II}}(x) = Te^{ik'x} \qquad \left(k' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}\right) \tag{2.86}$$

になる．ここで，反射係数 R と透過係数 T は，ポテンシャルが不連続ではあっても有限であれば波動関数とその x-微分が連続（練習問題 2.6.1）になることから，$x = 0$ で $1 + R = T$ および $ik(1 - R) = ik'T$ の条件が得られ，これを解いて

$$R = \frac{k - k'}{k + k'}\,, \quad T = 1 + R = \frac{2k}{k + k'} \tag{2.87}$$

と決定される．$x = 0$ における反射と透過の確率は，反射波 $\psi_{\text{ref}}(x) = Re^{ikx}$ と透過波 $\psi_{\text{tr}}(x) = Te^{ik'x}$ から計算される確率の流れの密度 $J_{\text{ref}} = \frac{\hbar k}{m}|T|^2$ と $J_{\text{tr}} = \frac{\hbar k'}{m}|T|^2$ を使って

$$\Pr(\text{反射}) = \frac{J_{\text{ref}}}{J_{\text{in}}} = |R|^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'}\right)^2, \tag{2.88}$$

$$\Pr(\text{透過}) = \frac{J_{\text{tr}}}{J_{\text{in}}} = |T|^2\frac{k'}{k} = \frac{4kk'}{(k + k')^2} \tag{2.89}$$

と表され，関係 $\Pr(\text{反射}) + \Pr(\text{透過}) = 1$ が満たされる．ここで，$V_0 = 0$ の場合は，$k = k'$ となって反射の確率が 0 になり，期待すべき結果に至る．量子力学は，$\mathbb{H}$ に含まれない解に対しても，正しい物理的結果を導くのである．

練習問題 2.6.1

空間 1 次元の問題で，ポテンシャルが有界で $|V(x)| <$ 有限値 であるなら，波動関数 $\psi(x)$ とその微分 $\partial_x\psi(x)$ は連続になることを確かめよ．

解答 時間に依存しないシュレディンガー方程式を

$$\partial_x^2\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left(V(x) - E\right)\psi(x)$$

と表し，任意の点 x_0 を含む微小区間 $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ で積分すると，

$$\left|\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx\partial_x^2\psi(x)\right| = |\partial_x\psi(x_0 + \epsilon) - \partial_x\psi(x_0 - \epsilon)|$$

*8) このときの確率の流れの密度は，$J_{\text{in}} = \frac{\hbar k}{m}$．

$$\le \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \, |(V(x) - E)\psi(x)| \to 0, \ (\epsilon \to 0),$$

を得て，$\partial_x \psi(x)$ は連続になる．また，波動関数に不連続点があれば，その点で $\partial_x \psi(x)$ が無限大になり，シュレディンガー方程式は $\partial_x^2 \psi(x)$ に釣り合う項がないため成立しない．従って，波動関数も連続でなくてはならない．□

2.6.2 井戸型ポテンシャル

無限に高い壁で囲まれた 1 次元の井戸型ポテンシャル（図 2.5）の問題は，x-表示のシュレディンガー方程式を解いて，束縛状態の離散エネルギースペクトルが生じる最も簡単な例となっている．考えている系のポテンシャルは，

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L), \\ \infty & (x \le 0, \ L \le x) \end{cases} \tag{2.90}$$

であり，$0 < x < L$ での時間に依存しないシュレディンガー方程式は (2.77) に他ならない．従って，その解は (2.79) の線形結合で，$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE}$ として

$$\psi_E(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \ (A, B: \text{定数}) \tag{2.91}$$

と書ける．ここで，粒子が $x \le 0$ に存在しないことを表す境界条件 $\psi_E(0) = 0$ から $B = 0$ となり，次いで $x \ge L$ に粒子が存在しないことを表す境界条件 $\psi_E(L) = 0$ から，可能なエネルギースペクトルが

$$k = k_n = \frac{\pi n}{L} \ \Rightarrow \ E = E_n = \frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar \pi n}{L}\right)^2, \ (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{2.92}$$

と決定される．また，固有状態を $\langle \psi_{E_n} | \psi_{E_m} \rangle = \int_0^L dx \psi_{E_n}(x)^* \psi_{E_m}(x) = \delta_{nm}$ で規格化すれば，規格化因子は $A = \sqrt{2/L}$ になり，状態の最終的な形は

$$\psi_{E_n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}\right), \ (n = 1, 2, 3, \cdots) \tag{2.93}$$

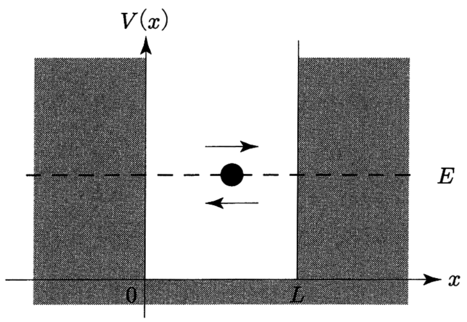


図 2.5　井戸型ポテンシャルによる束縛状態粒子は，$x = 0, L$ にある無限に高い壁の外側に出ることができず，対応する波の波動関数は $\psi_E(0) = \psi_E(L) = 0$ を満たす．

となる．固有状態 $\{\psi_{E_n}\}$ を基底とする自乗可積分な関数の空間 $L_2(0,L)$ は，物理的意味が明瞭で自然な確率解釈の許される状態空間ではあるが，$\hat{p}$ の作用は境界条件を壊し，$\hat{H}$ の作用は自乗可積分の性質を失わせることもある．従ってこのポテンシャル問題の場合も，$\{\hat{x},\hat{p},\hat{H}\}$ を矛盾なく扱うためには，より広い関数空間の枠組みの中で考える必要がある．

練習問題 2.6.2

基底状態 $\psi_{E_1}(x)$ の下での，位置の演算子 $\hat{x}$ の期待値と分散を求めよ．

解答

$$
\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \frac{2}{L}\int_0^L dx x\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) = \frac{1}{L}\int_0^L dx x\left\{1-\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\} \\
&= \frac{1}{L}\frac{x^2}{2}\bigg|_0^L - \frac{1}{L}\int_0^L dx x\frac{d}{dx}\left\{\frac{L}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\} = \frac{L}{2}.
\end{aligned}
$$

同様に，

$$
\begin{aligned}
\langle x^2\rangle &= \frac{1}{L}\int_0^L dx x^2\left\{1-\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\} \\
&= \frac{1}{L}\frac{x^3}{3}\bigg|_0^L - \frac{1}{L}\int_0^L dx x^2\frac{d}{dx}\left\{\frac{L}{2\pi}\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\} \\
&= \frac{L^2}{3} - \frac{1}{\pi}\int_0^L dx x\left\{\frac{L}{2\pi}\frac{d}{dx}\cos\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\} = \frac{L^2}{3} - \frac{L^2}{2\pi^2}.
\end{aligned}
$$

従って，位置の分散は，

$$
\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} = L\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{1}{2\pi^2}-\frac{1}{4}} \simeq L\times 0.1807. \qquad \square
$$

練習問題 2.6.3

運動量演算子の基底状態への作用は $\hat{p}\psi_{E_1}(x) = -i\hbar\frac{\pi}{L}\sqrt{\frac{2}{L}}\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) \notin \{\psi_{E_n}\}$ を導くが，これに意味があるとして ψ_{E_1} の下での運動量の期待値と分散を求め，前問の結果と合わせて不確定性 $\Delta x\Delta p$ を評価せよ．

解答

$$
\langle p\rangle = \langle\psi_{E_1}|\hat{p}|\psi_{E_1}\rangle = -i\hbar\frac{\pi}{L}\times\frac{2}{L}\int_0^L dx\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\cos\left(\frac{\pi}{L}x\right) = 0,
$$

$$
\langle p^2\rangle = \langle\psi_{E_1}|\hat{p}^2|\psi_{E_1}\rangle = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2\langle\psi_{E_1}|\psi_{E_1}\rangle = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2.
$$

これから，$\Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} = \frac{\pi}{L}$ を得て，前問と合わせて

$$
\Delta x\Delta p = \hbar\times\pi\sqrt{\frac{1}{3}-\frac{1}{2\pi^2}-\frac{1}{4}} \sim \hbar\times 0.5678 \gtrsim \frac{\hbar}{2}. \qquad \square
$$

2.6.3 調和振動子

調和振動子は，非常に応用範囲の広い力学系であり，現実の複雑なポテン

シャルの系においても安定点の周りで2次近似したものは，自然に調和振動子系と等価になる．また，ハミルトニアンの固有状態やエネルギースペクトルが厳密に求まる，典型的な束縛状態の系となっている．以下，粒子位置を q，粒子質量を m，ばね定数を $m\omega^2$ で表す1次元調和振動子系の作用

$$S[q] = \int dt L(q, \dot{q}) = \int dt \left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 - \frac{m\omega^2}{2}q^2 \right) \tag{2.94}$$

から始めると，q に正準共役な運動量が $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} = m\dot{q}$ であるから，系のハミルトニアンが

$$H = p\dot{q} - L = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \tag{2.95}$$

と決まる．従って，正準量子化を経て導かれる時間に依存しない q-表示のシュレディンガー方程式は，

$$\langle q| \left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 \right) |\psi_E\rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2 \right) \psi_E(q) \tag{2.96}$$

$$= E\psi_E(q),\quad (\,\psi_E(q) = \langle q|\psi_E\rangle\,), \tag{2.97}$$

あるいは無次元の変数 $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q$ を用い，$\psi_E(q) = \psi_E(\xi)$ として

$$\frac{d^2\psi_E(\xi)}{d\xi^2} + \left(\frac{2E}{\hbar\omega} - \xi^2 \right) \psi_E(\xi) = 0 \tag{2.98}$$

である．さらに，上式の $|\xi| \gg 1$ での漸近解が $\psi_E(\xi) \propto e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ であることに注意して*9)

$$\psi_E(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\phi_E(\xi) \tag{2.99}$$

と置くと，$\phi_E(\xi)$ はエルミートの微分方程式

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} - 2\xi\frac{d}{d\xi} \right) \phi_E(\xi) = -2\lambda\phi_E(\xi),\quad \left(2\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \right) \tag{2.100}$$

を満たす．この方程式の解が $\langle\psi_E|\psi_E\rangle = 1$ と規格化可能で $\psi_E \in \mathcal{H}$ であるためには，$|\phi_E(\xi)| = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}|\phi_E(\xi)| \to 0, (|\xi| \to \infty)$ でなくてはならない．

さて，エルミートの微分方程式を解くために，ラプラス型の変換

$$\phi_E(\xi) = \int_C d\zeta e^{2\xi\zeta} v_\lambda(\zeta) \tag{2.101}$$

を行う．ここで C を，境界値を残さず部分積分を行える複素 ζ-面上の経路とすれば，方程式 (2.100) は，

*9) 単純計算から，

$$\frac{d^2}{d\xi^2}e^{-\frac{1}{2}\xi^2} = \left(-1 + \xi^2 \right) e^{-\frac{1}{2}\xi^2} \approx \xi^2 e^{-\frac{1}{2}\xi^2},\quad (\,|\xi| \gg 1\,).$$

これは (2.98) で左辺第2項を無視した方程式を満たしている．

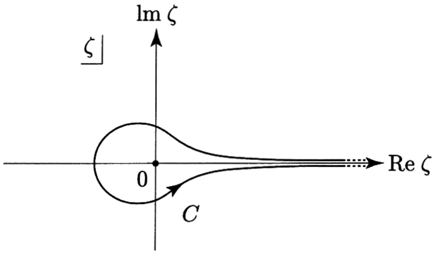


図 2.6 複素 ζ-平面上で原点を周回し，実軸遠方で $|v_\lambda(\zeta)|$ を 0 にする閉路 C．λ が正整数であれば，単位円周に置き換えられる．

$$\begin{aligned}\left(\frac{d^2}{d\xi^2}-2\xi\frac{d}{d\xi}\right)\phi_E(\xi) &= \int_C d\zeta\left[(2\zeta)^2e^{2\xi\zeta}-(2\zeta)\left\{\frac{\partial}{\partial\zeta}e^{2\xi\zeta}\right\}\right]v_\lambda(\zeta)\\ &= \int_C d\zeta e^{2\xi\zeta}\left[(2\zeta)^2+2+(2\zeta)\frac{\partial}{\partial\zeta}\right]v_\lambda(\zeta)\\ &= \int_C d\zeta e^{2\xi\zeta}\left[-2\lambda\right]v_\lambda(\zeta)\end{aligned}$$

となる．この方程式を成立させるために $v_\lambda(\zeta)$ が満たすべき 1 階の微分方程式は，N を積分定数として $v_\lambda(\zeta)=Ne^{-\zeta^2}\zeta^{-(\lambda+1)}$ と解ける．$\phi_E(\xi)$ を既知の特殊関数に帰着させるために $N=1/(2\pi i)$ と選ぶと，最終的に

$$\phi_E(\xi)=\frac{1}{2\pi i}\int_C d\zeta\frac{e^{2\xi\zeta-\zeta^2}}{\zeta^{\lambda+1}} \tag{2.102}$$

と決定される．ここで，C を原点 $\zeta=0$ を周る閉路（図 2.6）とすれば，コーシーの積分公式により $\phi_E(\xi)$ は $\lambda=n\,(=0,1,2,\cdots)$ のとき多項式となって，$\psi_E(\xi)$ の規格化の要請が満たされる．従って，可能な E の値は，

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right),\ (n=0,1,2,\cdots) \tag{2.103}$$

であり，対応する $\phi_{E_n}(\xi)$ の形は，$e^{2\xi\zeta-\zeta^2}=e^{\xi^2}e^{-(\xi-\zeta)^2}$ に注意して

$$\phi_{E_n}(\xi)=e^{\xi^2}\left[\left(\frac{\partial}{\partial\zeta}\right)^n e^{-(\xi-\zeta)^2}\right]_{\zeta=0}=(-1)^n e^{\xi^2}\left(\frac{\partial}{\partial\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \tag{2.104}$$

$$=H_n(\xi)\ \cdots\ \text{エルミート多項式} \tag{2.105}$$

になる．

以上は，シュレディンガー方程式を解くという量子力学の基本的な手順に従って，調和振動子の波動関数とエネルギー固有値を求めたものであり，一見すると井戸型ポテンシャルの問題より複雑である．後の章では，行列力学や経路積分という異なる立場から同じ基本問題を再考するが，実は正確に答えを出せるという意味において，調和振動子系は井戸型ポテンシャルの系より簡単であることが明らかになる．

2.6.4 水素型原子

水素型原子は量子力学の起源となる力学系であり，原子が吸収・放出する光のスペクトルを説明し，原子が外部電磁波に対して引き起こす分散を説明する過程で，量子力学が完成されていった．考えている系は多体系であるが，その重心静止系では，原点にある正電荷 Ze, (Z : 原子番号) の下で運動する 1 電子の系（水素型原子）が，系のエネルギースペクトル構造を調べる上で良い近似となる．このような系のハミルトニアンは，電子の位置と運動量演算子 $(\hat{\boldsymbol{r}}, \hat{\boldsymbol{p}})$ を用いて，$\boldsymbol{r}$-表示で

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{Ze^2}{r}, \ \ (r = |\boldsymbol{r}|\,,\, \hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla\,) \tag{2.106}$$

と表される．ここで m は陽子と電子の換算質量*10) を表す．

ハミルトニアン (2.106) はベクトル量の大きさだけで書かれており，明らかに原点を通る任意軸 $\boldsymbol{n}, (|\boldsymbol{n}| = 1)$ の周りの（微小）回転 $\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{r}$ $(\delta\boldsymbol{r} = \delta\theta\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{r},\ |\delta\theta| \ll 1)$ の下で対称である．この回転は，状態の変換

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi'\rangle \equiv \langle \boldsymbol{r}'|\psi\rangle \simeq e^{\delta\boldsymbol{r}\cdot\nabla}\langle \boldsymbol{r}|\psi\rangle = \langle \boldsymbol{r}|e^{\frac{i}{\hbar}\delta\phi\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}|\psi\rangle \tag{2.107}$$

を引き起こす．ここで，

$$\hat{L} = \boldsymbol{r} \times \hat{p},\ (\,\hat{L}_i = \epsilon_{ijk}x_k\hat{p}_k\,) \tag{2.108}$$

は電子の軌道角運動量の演算子で*11)，(2.107) より状態に回転の生成子として作用する．また，定義より角運動量演算子のベクトルへの作用

$$[\hat{L}_i, x_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}x_k\,, \tag{2.109}$$

$$[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_k \tag{2.110}$$

も，容易に確かめられる．これらは，無限小回転の下でのベクトルの変換そのものを定義しており，角運動量自身もベクトルであるから

$$\boxed{\left[\hat{L}_i, \hat{L}_j\right] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{L}_k} \tag{2.111}$$

が成立する．以上の交換関係を用いて，ハミルトニアンの回転不変性 $[\hat{\boldsymbol{L}}, \hat{H}] = 0$ を確かめることも容易である．これは角運動量の保存と共に，異なる状態 ψ と $\psi' = e^{\frac{i}{\hbar}\delta\theta\boldsymbol{n}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}}\psi$ が同じエネルギー固有値に属することを意味し，ハミルトニア

---

*10) 換算質量は，$m_{\rm p}$, $m_{\rm e}$ をそれぞれ陽子質量と電子質量として $m = m_{\rm p}m_{\rm e}/(m_{\rm p} + m_{\rm e})$ である．水素型原子模型は，原子の良いエネルギースペクトルを与えるが，Z が大きくなると遮蔽効果により陽子と外殻電子の間のクーロン力が弱まるため，現象論的に $Z \to Z_{\rm eff}\ (< Z)$ と置き換える必要がある．

*11) ベクトル成分を $\boldsymbol{A} = (A_x, A_y, A_z) = (A_1, A_2, A_3)$ と記した上で，重複する添字の和を省略して $\sum_{i,j=1}^{3} \epsilon_{ijk}x_j\hat{p}_k \equiv \epsilon_{ijk}x_j\hat{p}_k$ と表記した．ここで，ϵ_{ijk} は，$\boldsymbol{e}_i$ を i 軸方向の単位ベクトルとして，$\epsilon_{ijk} = \boldsymbol{e}_i \cdot (\boldsymbol{e}_j \times \boldsymbol{e}_k)$ である．

ンの固有値は縮退する．

さて，角運動量演算子は，定義から

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \boldsymbol{r}^2\hat{\boldsymbol{p}}^2 + i\hbar\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - (\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 \tag{2.112}$$

を満たし，これを使ってハミルトニアン (2.106) を

$$\hat{H} = \frac{1}{2mr^2}\left\{\hat{\boldsymbol{L}}^2 - i\hbar\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + (\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2\right\} - \frac{Ze^2}{r} \tag{2.113}$$

と表すことができる．ハミルトニアン (2.113) において，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ は他の全ての演算子と可換であり，これを予め固有値に置き換えることができる．角運動量演算子の固有値は，(2.111) の代数と波動関数の 1 価性から決まり，$\hat{L}_3$（回転の生成子）と $\hat{L}^2$（回転不変量）とが可換で共通の固有状態を持つことから，

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2|l,M\rangle = \hbar^2 l(l+1)|l,M\rangle,\ (l=0,1,2,\cdots), \tag{2.114}$$

$$\hat{L}_3|l,M\rangle = \hbar M|l,M\rangle,\ (M=l,l-1,\cdots,-l) \tag{2.115}$$

が導かれる（付録 D.3）．ここで，電子の位置座標を極座標 (r,θ,φ) で表すと，$\hat{L}$ はスケール変換 $\boldsymbol{r}\to a\boldsymbol{r}$ で不変であるため (θ,φ) のみで表されて $\langle\theta,\varphi|l,M\rangle = Y_{lM}(\theta,\varphi)$ と書ける．一方，動径座標は $\boldsymbol{r}\cdot\nabla = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$ を満たす*12)．従って，軌道角運動量 l の下でハミルトニアンの固有値が E となる固有状態を $|\psi_{E,l}\rangle = |\chi_{E,l}\rangle\times|l,M\rangle$, ($\langle r|\chi_{E,l}\rangle = \chi_{E,l}(r)$) と表せば，極座標表示の時間に依存しないシュレディンガー方程式 $\langle r,\theta,\varphi|(\hat{H}-E)|\psi_{E,l}\rangle = 0$ は，1 次元の波動方程式

$$\left[\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left\{l(l+1) - r\frac{d}{dr} - \left(r\frac{d}{dr}\right)^2\right\} - E\right]\chi_{E,l}(r) = 0 \tag{2.116}$$

に帰着される．ここで，無次元の変数 $\rho = r/\sqrt{-(\hbar^2/8mE)}$ および $n = \sqrt{-(mZ^2e^4/2\hbar^2E)}$ を導入して $\chi_{E,l}(r) = R_{E,l}(\rho)$ と書くと，上式はさらに

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{d}{d\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + \frac{n}{\rho} - \frac{1}{4}\right]R_{E,l}(\rho) = 0 \tag{2.117}$$

と変形される．波動方程式 (2.116) あるいは (2.117) で $Z=1$ と置いた形は，シュレディンガーが第 1 論文で導いた水素原子の波動方程式そのものである．

この方程式は $\rho=0$ と $\rho=\infty$ に特異点を持ち，それぞれの特異点の近傍で $R_{E,l}(\rho)\propto\rho^l$, $(\rho\sim 0)$ および $R_{E,l}(\rho)\propto e^{-\frac{\rho}{2}}$, $(\rho\gg 1)$ の漸近解を持つ．そこ

---

*12) $\boldsymbol{e}_r, \boldsymbol{e}_\theta, \boldsymbol{e}_\varphi$ を点 $\boldsymbol{r}(r,\theta,\varphi)$ から r,θ,φ の増加する方向への単位ベクトルとすれば，$d\boldsymbol{r} = \boldsymbol{e}_r dr + \boldsymbol{e}_\theta r d\theta + \boldsymbol{e}_\varphi r\sin\theta d\varphi$．そこで，$d\boldsymbol{r}\cdot\nabla = dr\frac{\partial}{\partial r} + d\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + d\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}$ とおくと，

$$\nabla = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi},\quad \left(\boldsymbol{e}_r = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)$$

を得て，$\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}$ となる．

で，$R_{E,l}(\rho) = \rho^l e^{-\frac{\rho}{2}} L_{E,l}(\rho)$ と置いて $L_{E,l}(\rho)$ の満たす方程式を求めると[*13)]，ラゲールの陪微分方程式

$$\left[\rho\frac{d^2}{d\rho^2} + (2l+2-\rho)\frac{d}{d\rho} + (n-l-1)\right] L_{E,l}(\rho) = 0 \tag{2.118}$$

となる．この方程式は，ラプラス変換型の積分表示

$$L_b^{(a)}(\rho) = \frac{1}{2\pi i}\int_C d\zeta(-\zeta)^b e^{-\rho\zeta}\left\{\frac{1}{\Gamma(a+1)}\frac{(1+\zeta)^a}{\zeta^{a+1}}\right\}, \tag{2.119}$$

$$(\ a = n+l,\ b = 2l+1 \le a\ )$$

（C は図 2.6 の経路）で与えられるラゲール関数を解として持つ．このとき，状態の規格化可能条件 $\int_0^\infty d\rho\rho^2 R_{E,l}^2 < \infty$, $(dV \propto d\rho\rho^2)$ が満たされるためには，$a =$ 正整数 であればよい．この場合，(2.119) が原点に特異点を持つ関数の周回積分になり，コーシーの積分公式により $L_b^{(a)}(\rho)$ は多項式になる[*14)]．この結果，n は $l+1 \le n$ を満たす整数となり，この形を E に置き戻すと

$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{2.120}$$
$$\big(n = l+1, l+2, l+3, \cdots\big)$$

が得られる．これが (1.5) に対応する，完成された量子力学の結論である．

以上は，波動方程式を解くというシュレディンガーの手順に従って，物理的な幾つかの基本問題に対するエネルギースペクトル等の観測量に対する情報を導いた結果である．同じ情報は，行列力学や，後に述べる経路積分の手法によっても得られるが，それぞれに結び付いた物理的描像はかなり違ったものであり，それらの手法を通して，量子力学自体の奥行を知ることができる．

練習問題 2.6.4

$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r} + \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$ を確かめ，これを用いて，水素型原子のハミルトニアンが

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + \frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{r}$$

と書けることを示せ．

解答 $\hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r} = [\hat{p}_i, \frac{r_i}{r}] + \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\nabla\cdot\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) + \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\frac{2}{r} + \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}$ および $\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial r}$ に注意すると，

---

*13) シュレディンガーは H. ワイルの示唆に従って，本質的に以下と同様の手順で微分方程式 (2.117) の解を調べた．

*14) $L_a^{(b)}(\rho) = \left(\frac{d}{d\rho}\right)^b L_a(\rho)$．ここで，$L_a(\rho) = e^\rho\left(\frac{d}{d\rho}\right)^a\left(e^{-\rho}\rho^a\right)$ は，ラゲール微分方程式 $\rho L_a'' + (1-\rho)L_a' + aL_a = 0$ の解であり，陪微分方程式はラゲール微分方程式を $b(\le a)$ 回微分したものに他ならない．

$$\hat{p}_r = \frac{1}{2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\right)$$

が得られる．また，$\hat{p}_r^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$ であるから，

$$(\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 - i\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}) = \left(-i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\right)^2 - i\hbar\left(-i\hbar r\frac{\partial}{\partial r}\right) = -\hbar^2 r^2\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)$$
$$= r^2\hat{p}_r^2$$

となり，これをハミルトニアン (2.113) に代入すると，示すべき形となる．□

注）$\hat{p}_r$ は $r=0$ に特異性を持ち，実軸全体で定義されていない．もし，$\hat{p}_r$ が実軸全体で定義された r に共役なエルミート演算子であれば，ユニタリ変換により $e^{-\frac{i}{\hbar}a\hat{p}}re^{\frac{i}{\hbar}a\hat{p}} = r+a$ となり，r の定義域は実軸全体にわたることになる．

練習問題 2.6.5

境界条件 $\sqrt[4]{g(q)}u(q)\Big|_{a,b} = 0,\ (a \le q \le b)$ を満たす状態 $\{u, v, \cdots\}$ に対し，$(u|v) = \int_a^b dq\sqrt{g}u^*v$ により内積を定義する．このような状態空間において，運動量演算子

$$\hat{p}_q = -i\hbar\left(\frac{d}{dq} + \frac{1}{2}\Gamma(q)\right),\quad \left(\Gamma(q) = \frac{d}{dq}\log\sqrt{g(q)}\right)$$

が，エルミート性を持つことを示せ．

解答 $\hat{p}_q = -i\hbar e^{-\frac{1}{2}\log\sqrt{g}}\frac{\partial}{\partial q}e^{\frac{1}{2}\log\sqrt{g}} = -i\hbar(g)^{-\frac{1}{4}}\frac{\partial}{\partial q}g^{\frac{1}{4}}$ に注意すると，

$$(u|\hat{p}_q|v)^* = \left[\int_a^b dq g^{\frac{1}{2}}u^*\left(-i\hbar g^{-\frac{1}{4}}\frac{d}{dq}g^{\frac{1}{4}}\right)v\right]^*$$
$$= i\hbar\int_a^b dq\left\{\frac{d}{dq}\left(g^{\frac{1}{4}}v^*\right)\right\}\left(g^{\frac{1}{4}}u\right)$$
$$= \int_a^b dq\left(g^{\frac{1}{4}}v^*\right)\left\{-i\hbar\frac{d}{dq}\left(g^{\frac{1}{4}}u\right)\right\} = (v|\hat{p}_q|u).\quad □$$

注）$\hat{p}_q$ を運動量演算子とする非相対論的粒子のハミルトニアンは，

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}_q^2 + V(q) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dq^2} + \Gamma(q)\frac{d}{dq}\right) + V(q)$$

となり，水素型原子の動径変数のハミルトニアンを，$q = r, \Gamma(r) = \frac{1}{r}$ の特殊な場合として含む．

2.7 相対論的波動方程式

シュレディンガー方程式は，非相対論的力学を基に組み立てられているが，シュレディンガー自身は，波動方程式の建設の過程で相対論的方程式も試みている．波動方程式の相対論化の試みは，シュレディンガー方程式の登場以降に

時を置かず，クライン–ゴルドン–フォックを初めとする試みが現れた．

2.7.1　クライン–ゴルドン方程式

相対論的世界では光速 c が普遍定数であり，質量 m の相対論的自由粒子のエネルギー E と運動量 $\boldsymbol{p}$ は，**分散関係** $\left(\frac{E}{c}\right)^2 - \boldsymbol{p}^2 - (mc)^2 = 0$ を満たす．前章 1.5 節で述べたように，相対論的波動方程式の基本的な考え方は，シュレディンガー方程式との対応から分散関係で $E \to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, $\boldsymbol{p} \to -i\hbar\nabla$ の置き換えを行うものであった．こうして得られた**クライン–ゴルドン方程式**と呼ばれる (1.23) は，時間変数 $x^0 = ct$ と 3 次元ベクトル $\boldsymbol{r} = (x^1, x^2, x^3)$ を組み合わせた 4 次元ベクトル $(x^\mu) = (x^0, \boldsymbol{r})$, $(x_\mu) = (x^0, -\boldsymbol{r})$ による微分記号 $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$, $\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ を用いて，

$$\left[\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\psi(\boldsymbol{r}, t) = 0 \tag{2.121}$$

とも表され，シュレディンガー方程式の自然な拡張ではあるが，その解はシュレディンガーの波動関数と本質的に性格が異なっていた．

まず，方程式が $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \pm c\sqrt{\hat{\boldsymbol{p}}^2 + (mc)^2}\psi$ と書き換えられるため，解には負エネルギーの状態が含まれる．また，

$$J^\mu = \psi^* i\overleftrightarrow{\partial^\mu}\psi, \quad \left((J^\mu) = \frac{2m}{\hbar}(c\rho, \boldsymbol{I})\right) \tag{2.122}$$

と置くと[*15)]，(2.47) と同じ連続の方程式 $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\boldsymbol{I} = 0$ が満たされ，$\rho(\boldsymbol{r}, t)$ は確率密度に対応すべき量となる．ところが，例えば平面波解 $\psi = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})}$ に対して $\rho = \frac{E}{mc^2}|A|^2$, $(E = \pm c\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + (mc)^2})$ となって正定値には定まらず，確率解釈ができないのである．

2.7.2　ディラック方程式

1928 年，ディラックは，クライン–ゴルドン方程式と量子力学の齟齬の本質が，この方程式が時間に関する 2 階微分を含むことにあると考え，これを 1 階の連立微分方程式に置き換えることを試みた．ディラックは可能な方程式の形として，3 成分の行列 $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ と 1 成分の行列 β を用いて

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = \left(c\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \beta mc^2\right)\psi = \hat{H}\psi \tag{2.123}$$

を設定した ((1.24))．このとき，$\left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{c}\hat{H}\right)\left(i\frac{\hbar}{c}\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{c}\hat{H}\right)\psi = 0$ が (2.121) に戻ることを要請すると，$c^{-2}\hat{H}^2 = (\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}})^2 + \{\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}, \beta mc\} + \beta^2(mc)^2 = \hat{\boldsymbol{p}}^2 + (mc)^2$ から，行列 β, α_i は代数

$$\{\alpha_i, \beta\} \equiv \alpha_i\beta + \beta\alpha_i = 0,\ \beta^2 = 1, \tag{2.124}$$

---

*15)　$\psi^*\overleftrightarrow{\partial_t}\psi = \psi^*(\partial_t\psi) - (\partial_t\psi^*)\psi$ 等である．

$$\{\alpha_i, \alpha_j\} \equiv \alpha_i\alpha_j + \alpha_j\alpha_i = \delta_{ij} \tag{2.125}$$

を満たさなくてはならない．これより α_i, β の固有値は ± 1 であり，さらに $\mathrm{Tr}(\alpha_i) = \mathrm{Tr}(\beta^2\alpha_i) = -\mathrm{Tr}(\beta\alpha_i\beta) = -\mathrm{Tr}(\alpha_i\beta^2) = -\mathrm{Tr}(\alpha_i) = 0$ および（β, α_i の役割を入れ替えて）$\mathrm{Tr}(b) = 0$ となることから，行列は偶数次元の空間で表現されるが，ディラックはそれが可能な最小次元は 4 次元で，

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} = \sigma_1 \otimes \boldsymbol{\sigma}, \quad \beta = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{bmatrix} = \sigma_3 \otimes \mathbf{1} \tag{2.126}$$

が，可能な形であることを示した．ここで，$\mathbf{1}$ は 2×2 単位行列であり，$\boldsymbol{\sigma}$ は (D.41) のパウリ行列である*16)．パウリ行列は，交換関係 $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon\sigma_k$ を満たすことから，α_i, β と同じ表現空間の行列

$$\boldsymbol{S} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\mathbf{1} \otimes \boldsymbol{\sigma} \tag{2.127}$$

は，角運動量演算子の交換関係 $[S_i, S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$ を満たす．また，$[S_i, \alpha_j] = \frac{\hbar}{2}\sigma_1 \otimes [\sigma_i, \sigma_j] = \frac{\hbar}{2}\sigma_1 \otimes (2i\epsilon_{ijk}\sigma_k) = i\hbar\epsilon_{ijk}\alpha_k$ から，$\boldsymbol{\alpha}$ は $\boldsymbol{S}$ によりベクトルとして変換される．同様に，運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ も軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ によりベクトルとして変換され，交換関係 $[\hat{L}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{p}_k$ を満たす．従って，$[\hat{L}_i + S_i, \boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}] = 0$ を得て，(2.123) のハミルトニアン $\hat{H}$ の下で，

$$\frac{d}{dt}(\hat{\boldsymbol{L}} + \boldsymbol{S}) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\boldsymbol{L}} + \boldsymbol{S}] = 0 \tag{2.128}$$

が満たされる．こうして，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \boldsymbol{S}$ は保存する全角運動量となり，$\boldsymbol{S}$ は粒子の自転より生じる角運動量，即ち**スピン角運動量**の意味を持つ．また，(2.123) をブラ・ケットで表した $|\dot{\psi}\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle$ と $\hat{H}^\dagger = \hat{H}$ から，明らかに $\frac{d}{dt}\langle\psi|\psi\rangle = 0$ であり，4 成分の状態

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \begin{bmatrix} u^{(+)}(\boldsymbol{r}, t) \\ u^{(-)}(\boldsymbol{r}, t) \end{bmatrix}, \quad u^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, t) = \begin{pmatrix} u_1^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, t) \\ u_2^{(\pm)}(\boldsymbol{r}, t) \end{pmatrix} \tag{2.129}$$

から定義される $\psi^\dagger(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t) = u^{(+)\dagger}(\boldsymbol{r}, t)u^{(+)}(\boldsymbol{r}, t) + u^{(-)\dagger}(\boldsymbol{r}, t)u^{(-)}(\boldsymbol{r}, t)$ は，保存する確率密度を与えることになる．

一方，エネルギーの固有値に関しては，例えば静止系 ($\boldsymbol{p} = 0$) での定常波 $\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\psi(0)$ に対して，(2.123) から

$$Eu^{(\pm)}(0) = \pm(mc^2)u^{(\pm)} \tag{2.130}$$

*16) (D.41) を再掲すると，$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.
また行列 $a = [a_{ij}]$, $B = [B_{\alpha\beta}]$, $(i, j = 1, \cdots, N;\ \alpha, \beta = 1, \cdots, M)$ の直積は，$a \otimes B = [a_{ij}B]$ と定義され，$(a \otimes B)(a' \otimes B') = (aa') \otimes (BB')$ が確かめられる．

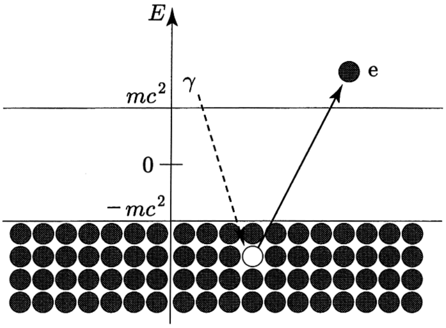


図 2.7　空孔理論に基づく電子・陽電子の対生成：真空が負エネルギー ($< -mc^2$) の電子の満ちた構造であれば，フェルミ統計により電子はより低いエネルギー状態に落ちることはなく，真空は安定となる．高いエネルギー ($> 2mc^2$) を与えて真空から電子を叩き出すと，電子の抜けた後の空孔は正電荷・正エネルギーの陽電子となる．

が導かれ，負エネルギーの状態が含まれることになる．ディラック方程式は，水素原子スペクトルの微細構造を説明するために必要な電子のスピンの自由度を $u_i^{(\pm)}, (i = 1, 2)$ の 2 成分を通して自然に取り入れることができたが，同時に電子と同じ質量の負エネルギー粒子を必要としたのである．

正エネルギー粒子が電子であるとすれば，負エネルギー粒子は電子と同じ質量で正電荷の粒子となり，これが未発見の時期はディラック理論の難点とされたが，1932 年に陽電子が発見されるに至って，理論の正しさが認められた．ディラックは，真空は負エネルギーの電子で充填された構造を持ち，そこから電子の抜け出た**空孔**が負エネルギー粒子の意味するもので，正エネルギー・正電荷の，電子の**反粒子**として観測されることを主張した（図 2.7）．このような解釈は，一つの量子状態を二つ以上の電子が占めることができない電子の（フェルミ）統計性の下で成立し，また ψ は確率に結び付く波動関数であった．

2.7.3　量子場としてのクライン–ゴルドン場

既に述べたクライン–ゴルドン方程式の解は，スピンの自由度を持たないスカラー関数でボーズ統計に従う粒子の状態関数に対応し，負エネルギー状態に対する空孔解釈は成立しない．また，状態関数は確率に結び付く波動関数ともなり得ない．後に中間子理論の基礎となるこの理論の本質を明らかにするには，1934 年のパウリ–ワイスコップ理論の登場を待たなくてはならなかった．

パウリ–ワイスコップの基本的な立場は，クライン–ゴルドン方程式を電磁場の方程式と同様に物質場の方程式と考え，この物質場（＝力学変数）にヨルダン–クラインやフォックにより準備されていた**第 2 量子化**[*17)] を適用し，**量子**

*17)　第 2 量子化は，$\hbar$ を含む場の方程式に従う物質場の量子化の意味で付けられた歴史的な呼称であり，実際には物質場を一度量子化するのみである．

場として扱うことにある．いま，時空の各点で定義された $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を力学変数とする作用関数を，$d^4\Omega = dtdV$, $d^4x = cdtdV$ として

$$S[\psi] = \int d\Omega\mathcal{L} = \hbar c \int d^4x \left\{ \partial_\mu \psi^* \partial^\mu \psi - \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \psi^* \psi \right\} \tag{2.131}$$

と置く[*18]．このとき (2.121) は，ψ^* に関する変分

$$\delta_{\psi^*} S[\psi] = -\hbar c \int d^4x \delta\psi^* \left\{ \partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \right\} \psi = 0 \tag{2.132}$$

の意味で導かれる．また，ラグランジアン密度は，$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 + \phi_2)$ により実関数のスカラー場 $\phi_i, (i = 1, 2)$ を導入すると

$$\mathcal{L} = \hbar \left\{ \dot{\psi}^* \dot{\psi} - c^2 (\nabla \psi^*) \cdot (\nabla \psi) \right\} - \frac{(mc^2)^2}{\hbar} \psi^* \psi \tag{2.133}$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} \left[\hbar \left\{ \dot{\phi}_i^2 - c^2 (\nabla \phi_i)^2 \right\} - \frac{(mc^2)^2}{\hbar} \phi_i^2 \right] \tag{2.134}$$

と書ける．これから，ϕ_i に正準共役な運動量密度が $\pi_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}_i} = \hbar \dot{\phi}_i$ となり，ハミルトニアン密度 $\mathcal{H} = \sum_i \pi_i \dot{\phi}_i - \mathcal{L}$ が，

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{2} \left[\frac{1}{\hbar} \pi_i^2 + \hbar c^2 (\nabla \phi_i)^2 + \frac{(mc^2)^2}{\hbar} \phi_i^2 \right] \tag{2.135}$$

と求まる．また，正準量子化 $[\hat{\pi}_i(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}_i(\boldsymbol{r}',t)] = -i\hbar\delta_{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ により，以下の交換関係が導かれる：

$$\begin{aligned} &[\hat{\phi}_i(\boldsymbol{r},t), \hat{\phi}_j(\boldsymbol{r}',t)] = [\dot{\hat{\phi}}_i(\boldsymbol{r},t), \dot{\hat{\phi}}_j(\boldsymbol{r}',t)] = 0\,, \\ &[\hat{\phi}_i(\boldsymbol{r},t), \dot{\hat{\phi}}_j(\boldsymbol{r}',t)] = i\delta_{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,. \end{aligned} \tag{2.136}$$

さて，$\left(\partial_\mu \partial^\mu + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right) f(x) = 0$ の一次独立な解である

$$f_k(x) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3 2\omega_k}} e^{-i\omega_k t + i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,, \quad \left(\omega_k \equiv c\sqrt{\boldsymbol{k}^2 + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2} \right) \tag{2.137}$$

を用いて，クライン–ゴルドン方程式を満たす $\hat{\phi}_i(x) = \hat{\phi}_i(\boldsymbol{r},t)$ を

$$\hat{\phi}_i(\boldsymbol{r},t) = \int d^3k \left[\hat{a}_i(\boldsymbol{k}) f_k(x) + \hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k}) f_k^*(x) \right] \tag{2.138}$$

と展開することができる．このとき，記号 $f \star g = f i \overleftrightarrow{\partial_t} g$, $\langle \cdots \rangle = \int dV(\cdots)$ の下で，(2.137) が $\langle f_k^* \star f_{k'} \rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ および $\langle f_k \star f_{k'} \rangle = \langle f_k^* \star f_{k'}^* \rangle = 0$

*18) ψ の次元の与え方により作用の表現は変わるが，以下ではシュレディンガー場，ディラック場と共通して，ψ の正準共役量が $\pi = \hbar\psi^*$ になる便宜に従っている．自然単位系 $\hbar = c = 1$ で考えれば，$d\Omega = d^4x$ であり，クライン–ゴルドン場のラグランジアン密度も $\mathcal{L} = \left\{ \partial_\mu \psi^* \partial^\mu \psi - m^2 \psi^* \psi \right\}$ と簡単な形になる．

と規格化されていることから,

$$\hat{a}_i(\boldsymbol{k}) = \langle f_k^* \star \phi_i \rangle = i\langle f_k^* \hat{\dot{\phi}}_i - \dot{f}_k^* \phi_i \rangle ,$$
$$\hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k}) = \langle f_k \star \phi_i \rangle = i\langle f_k \hat{\dot{\phi}}_i - \dot{f}_k \phi_i \rangle \tag{2.139}$$

となる．従って，同時刻の交換関係 (2.136) を考慮して,

$$[\hat{a}_i(\boldsymbol{k}), \hat{a}_j^\dagger(\boldsymbol{k}')] = \delta_{ij}\langle f_k^* \star f_{k'} \rangle = \delta_{ij}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'). \tag{2.140}$$

同様に，$\langle f_k \star f_{k'} \rangle = \langle f_k^* \star f_{k'}^* \rangle = 0$ から，$[\hat{a}_i(\boldsymbol{k}), \hat{a}_j(\boldsymbol{k}')] = [\hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k}), \hat{a}_j^\dagger(\boldsymbol{k}')] = 0$ である．従って，$(\hat{a}_i(\boldsymbol{k}), \hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k}))$ は，$(i, \boldsymbol{k})$ 空間の消滅演算子と生成演算子の意味を持つことが分かる．さらに，(2.138) の展開形を $\mathcal{H}$ および (2.122) の保存密度 J^0 に代入し，それぞれ

$$\hat{H} = \int dV \mathcal{H} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{2}\int d^3k\hbar\omega_k \left\{\hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{a}_i(\boldsymbol{k}) + \hat{a}_i(\boldsymbol{k})\hat{a}_i^\dagger(\boldsymbol{k})\right\}, \tag{2.141}$$

$$\hat{Q} = \int dV(cJ^0) = i\int d^3k \left\{\hat{a}_2^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{a}_1(\boldsymbol{k}) - \hat{a}_1^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{a}_2(\boldsymbol{k})\right\} \tag{2.142}$$

等を確かめることができる．

ここで，物質場のない真空状態を，$\hat{a}_i(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0$, $\langle 0|0\rangle = 1$ で定義すると，$\hat{H}$ は無意味な無限大の c-数を含むが，改めて $\hat{H}_0 = \hat{H} - \langle 0|\hat{H}|0\rangle$ を物質場のハミルトニアン演算子と考えれば，$\hat{H}_0|0\rangle = \hat{Q}|0\rangle = 0$ となる．また，n 励起状態 $a_{i_1}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\cdots a_{i_n}^\dagger(\boldsymbol{k}_n)|0\rangle$ は，固有値方程式

$$\hat{H}_0\hat{a}_{i_1}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\cdots\hat{a}_{i_n}^\dagger(\boldsymbol{k}_n)|0\rangle = \hbar\sum_{i=1}^{n}\omega_{k_i}\hat{a}_{i_1}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\cdots\hat{a}_{i_n}^\dagger(\boldsymbol{k}_n)|0\rangle \tag{2.143}$$

を満たし，n 粒子状態であることが分かる．従って，$E_n = \hbar\sum_{i=1}^{n}\omega_{k_i}$ として，重ね合わせの状態

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{i_1\cdots i_n} e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}C_{i_1\cdots i_n}(\boldsymbol{k}_1, \cdots, \boldsymbol{k}_n)$$
$$\times \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}_{i_1}^\dagger(\boldsymbol{k}_1)\cdots\hat{a}_{i_n}^\dagger(\boldsymbol{k}_n)|0\rangle \tag{2.144}$$

はシュレディンガー方程式 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}_0|\Psi(t)\rangle$ を満たし，確率解釈の適用される波動関数の意味を持つことになる．

付け加えると，演算子 $\hat{Q}$ は $\delta\hat{a}_i^\dagger = i[\hat{Q}, \hat{a}_i^\dagger] = -\hat{a}_2$, $\delta\hat{a}_2^\dagger = i[\hat{Q}, \hat{a}_2^\dagger] = \hat{a}_1^\dagger$ 等の意味で (ϕ_1, ϕ_2) の回転を引き起こし，$\hat{\psi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\phi}_1 + i\hat{\phi}_2)$ に対しては位相変換 ($U(1)$ 変換)

$$e^{i\theta\hat{Q}}\hat{\psi}e^{-i\theta\hat{Q}} = e^{i\theta}\hat{\psi} \tag{2.145}$$

の生成子となっている．ハミルトニアン演算子はこのような変換の下で不変（=対称）であり，$\hat{Q}$ が保存量となった．後に述べるように，$e\hat{Q}$, (e : 素電荷) は ψ が表す粒子の電荷に結び付き，(2.122) の ρ が正定値でないのは単に正負の荷電状態があることに過ぎない．パウリ–ワイスコップにより明らかにされた量子場と波動関数の解釈は，翻ってディラック方程式を物質場の方程式と考えることにより，空孔理論すら不要にすることになった．

練習問題 2.7.1

平面波解 (2.137) の規格化の形を確かめよ．

解答

$$\begin{aligned}\langle f_k^* \star f_{k'} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\omega_k}}\frac{1}{\sqrt{2\omega_{k'}}}\int \frac{dV}{(2\pi)^3} e^{i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})} i\overleftrightarrow{\partial_t} e^{-i(\omega_k t - \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})} \\ &= \frac{\omega_{k'} + \omega_k}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} e^{i(\omega_k - \omega_{k'})t}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') \\ &= \delta^{(3)}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')\,.\end{aligned}$$

同様に，$\langle f_k \star f_{k'} \rangle = \frac{\omega_{k'} - \omega_k}{2\sqrt{\omega_k \omega_{k'}}} e^{-i(\omega_k - \omega_{k'})t}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}') = 0$ 等である．□

2.7.4　物質場の第 2 量子化（シュレディンガー場，ディラック場，電磁場）

物質場の量子化の視点から，シュレディンガー方程式，ディラック方程式に従う波動場，および古典場として知られている電磁場を再考し，多体問題も含めた量子力学の考え方を整理する．

[2.7.4-A] シュレディンガー場

シュレディンガー方程式は，波動関数 ψ を力学変数である物質場と考えることにより，$\hat{H}$ 作用を 1 体系のハミルトニアン演算子として，作用

$$S[\psi] = \int dt \int dV \mathcal{L} = \int dt \int dV \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi \tag{2.146}$$

から，ψ^* に関する変分

$$\delta_{\psi^*} S[\psi] = \int dt \int dV \delta\psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi = 0 \tag{2.147}$$

の意味で導くことができる．正準形式への移行は，ラグランジアン密度 $\mathcal{L}$ を用いて ψ の正準共役な運動量を $\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\psi}} = i\hbar\psi^*$ と定めると，ハミルトニアン密度が

$$\mathcal{H} = \pi\dot{\phi} - \mathcal{L} = \psi^* \hat{H} \psi \tag{2.148}$$

と決定される．第 2 量子化は，正準交換関係

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}, t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}', t)] = i\hbar[\hat{\psi}(\boldsymbol{r}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}', t)] = i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{2.149}$$

を置くことに相当する．このとき，1 体系のハミルトニアンの固有状態

$$\hat{H}\phi_n(\boldsymbol{r}) = E_n\phi_n(\boldsymbol{r}) \quad (\langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm}) \tag{2.150}$$

が完全系を張る ($1 = \sum_n |\phi_n\rangle\langle\phi_n|$) として，

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{r}, t) = \sum_n \hat{a}_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{2.151}$$

と展開すれば，$(\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_n)$ に対する生成・消滅演算子の交換関係

$$\begin{aligned} [\hat{a}_n, \hat{a}_m^\dagger] &= \int dV \int dV \psi_n^*(\boldsymbol{r})\psi_m(\boldsymbol{r}')[\phi(\boldsymbol{r}, 0), \phi^*(\boldsymbol{r}^*, 0)] \\ &= \langle\phi_n|\phi_m\rangle = \delta_{nm} \end{aligned} \tag{2.152}$$

が導かれる．さらに，量子場のハミルトニアンは $(\hat{a}_n^\dagger, \hat{a}_n)$ を用いて

$$\mathscr{H} = \int dV \hat{\mathcal{H}} = \sum_n E_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \tag{2.153}$$

と表される．このとき，$\hat{a}_n|0\rangle = 0$, $(\langle 0|0\rangle = 1)$ で定義される基底状態は，$\mathscr{H}|0\rangle = 0$ を満たす物質場の無い状態，即ち真空状態を表す．また

$$|\Phi_{n_1\cdots n_N}^{(N)}\rangle = \hat{a}_{n_1}^\dagger \cdots \hat{a}_{n_N}^\dagger |0\rangle \tag{2.154}$$

で定義される励起状態は，固有値方程式 $\mathscr{H}|\Phi_{n_1\cdots n_N}^{(N)}\rangle = \sum_{i=1}^N E_{n_i}|\Phi_{n_1\cdots n_N}^{(N)}\rangle$ を満たし，i 番目の系のエネルギーが E_{n_i} に定まった，考えている系が粒子であるなら粒子数の定まった状態を表すことになる．このとき，明らかに $\hat{N} = \int dV \hat{\psi}^\dagger\hat{\psi} = \sum_n \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n$ は，粒子数の個数演算子である．

一方，状態 $\langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1, t)\cdots\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_N, t)|\Phi\rangle\ (\neq 0)$ は，ハイゼンベルクの運動方程式 $i\hbar\partial_t\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_i, t) = \hat{H}_i\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_i, t)$ から

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1, t)\cdots\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_N, t)|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i\langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1, t)\cdots\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_N, t)|\Phi\rangle$$

を満たし，N 体シュレディンガー波動関数であることが分かる．とくに，1 体状態 $|\Phi^{(1)}\rangle = \sum_n \hat{a}_n^\dagger|0\rangle c_n$ の与える

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}, t)|\Phi^{(1)}\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}\phi_n(\boldsymbol{r}) \tag{2.155}$$

は，1 体系の波動関数 (2.46) そのものである．量子場 $\hat{\psi}$ は，量子力学の波と粒子の二重性を自然に表現し，多体系を包括する理論形式を与えている．

量子場の枠組みでは，粒子の組み換えや粒子数の変化を，相互作用を通して記述することができる．例えば，$\eta(\boldsymbol{r})$ を c-数の実関数 (Re ψ の源)，g を結合定数として，(2.146) に相互作用項

$$\mathcal{L}_{\rm int} = -g\eta(\boldsymbol{r})\left(\psi(\boldsymbol{r}, t) + \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\right) \tag{2.156}$$

を付け加えると，量子場のハミルトニアンに場の相互作用項

$$\mathscr{H}_{\rm int} = g\eta(\boldsymbol{r})\left(\hat{\psi}(\boldsymbol{r}',t) + \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\right) \tag{2.157}$$

が付加される．明らかに，$\mathscr{H}_{\rm int}$ は粒子数演算子 $\hat{N} = \int dV \hat{\psi}^\dagger\hat{\psi}$ と可換ではなく，相互作用を通して粒子数は変化する．

[2.7.4-B] ディラック場

自由ディラック場の作用を書き下すために，方程式 (2.123) を $(x^\mu) = (x^0 = ct, \boldsymbol{r})$，$\gamma^0 = \beta = \sigma_3 \otimes \boldsymbol{1}$，$\gamma^i = \beta\alpha_i = i\sigma_2 \otimes \sigma_i$ 等の相対論的な記法を用いて，

$$\left\{i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - (mc)\right\}\psi = 0 \tag{2.158}$$

の形に表す．ここで，ψ は (2.129) の構造を持つ 4 成分波動関数であり，γ^μ はミンコウスキー計量（(D.11)）$\eta^{\mu\nu}$ を用いた反交換関係

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} \equiv \gamma^\mu\gamma^\nu + \gamma^\nu\gamma^\mu = 2\eta^{\mu\nu}, \ \left((\gamma^0)^2 = -(\gamma^i)^2 = \boldsymbol{1}\right) \tag{2.159}$$

で特徴づけられる．簡単のため，$\not{A} = A^\mu\gamma_\mu$ の様な記号を導入すると，(2.158) を導く物質場 ψ の作用は，$\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ として，

$$S[\psi] = \int dt \int dV \mathcal{L} = \int d^4x \bar{\psi}\left\{i\hbar\not{\partial} - (mc)\right\}\psi \tag{2.160}$$

と書ける．ここで ψ は，2 組のスピン $\frac{\hbar}{2}$ 表現を組み合わせた 4 成分量であり，無限小パラメーター $\delta\omega^{\mu\nu}$ によるローレンツ変換の下で

$$\delta\psi = \frac{i}{2}\delta\omega^{\mu\nu}S_{\mu\nu}\psi, \quad \left(S_{\mu\nu} \equiv \frac{i}{4}\gamma_{[\mu}\gamma_{\nu]}\right) \tag{2.161}$$

と変換される．定義より，$S_i \equiv S_{jk} = \boldsymbol{1} \otimes \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_i$, $(i,j,k = 1,2,3$ 循環的$)$ であり，S_i は (2.127) で $\hbar = 1$ とした空間回転の生成子に他ならない．また，$R_i \equiv S_{0i} = \frac{1}{2}\sigma_1 \otimes \sigma_i$ も確かめられ，$\sigma_1^2 = \boldsymbol{1}$, $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sigma_k$ から，(S_i, R_i) がローレンツ変換の生成子の代数

$$[S_i, S_j] = iS_k, \ [S_i, R_j] = iR_j, \ \text{および}\ [R_i, R_j] = -iS_k \tag{2.162}$$

を満たすことも明らかである．一方，$\gamma^{0\dagger} = \gamma^0, \gamma^{i\dagger} = -\gamma^i = \gamma^0\gamma^i\gamma^0$ から $S^\dagger_{\mu\nu} = \gamma^0 S_{\mu\nu}\gamma^0$ を得て $\delta\psi^\dagger = -\frac{1}{2}\delta\omega^{\mu\nu}\psi^\dagger\gamma^0 S_{\mu\nu}\gamma^0$，あるいは

$$\delta\bar{\psi} = -\frac{i}{2}\delta\omega^{\mu\nu}\bar{\psi}S_{\mu\nu} \ \Rightarrow \ \delta(\bar{\psi}\psi) = 0 \tag{2.163}$$

が確かめられる．同様に，$\bar{\psi}\gamma\psi$ が 4 次元ベクトルとして変換されることも確かめられ，ローレンツ不変な作用を構成するために，(2.160) で $\psi^\dagger$ ではなく $\bar{\psi}$ を使う必要があったことが分かる．

さて，(2.160) から ψ に正準共役な運動量は $\pi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\psi}} = i\hbar\psi^\dagger$ であり，場のハミルトニアン密度 $\mathcal{H} = \pi\dot{\psi} - \mathcal{L}$ は

$$\mathcal{H} = c\bar{\psi}\left\{i\hbar\gamma^0\partial_0 - (i\hbar\not{\partial} - (mc))\right\}\psi$$
$$= c\bar{\psi}\left\{-i\hbar\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla + (mc)\right\}\psi \qquad (2.164)$$

となる．次に，波動方程式 (2.158) を満たす ψ を平面波の重ね合わせで，

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_{s=1,2}\int \frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{mc^2}{E_k}}\left[b_s(\boldsymbol{k})u_s(k)e^{-ik\cdot x} + d_s^\dagger(k)v_s(\boldsymbol{k})e^{ik\cdot x}\right] \qquad (2.165)$$

と展開する．ただし，$\hbar ck^0 = c\sqrt{(\hbar\boldsymbol{k})^2+(mc)^2} = E_k$ であり，添え字 s は静止系 $(\boldsymbol{k}=0)$ でのスピンの自由度に対応する．このとき，(2.158) より

$$(\hbar\not{k} - mc)u_s(\boldsymbol{k}) = (\hbar\not{k} + mc)v_s(\boldsymbol{k}) = 0,$$
$$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})(\hbar\not{k} - mc) = \bar{v}_s(\boldsymbol{k})(\hbar\not{k} + mc) = 0 \qquad (2.166)$$

が要求され，$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})(\hbar\not{k} + mc)v_{s'}(\boldsymbol{k}) = 2mc\bar{u}_s(\boldsymbol{k})v_{s'}(\boldsymbol{k}) = 0$ を得て直交性 $\bar{u}_s(\boldsymbol{k})v_{s'}(\boldsymbol{k}) = \bar{v}_{s'}(\boldsymbol{k})u_s(\boldsymbol{k}) = 0$ が導かれる．また，静止系 $(\boldsymbol{k}=0)$ では $\hbar k^0 = mc$ に注意して $\gamma^0 u_s = u_s$ $(u_s^{(-)} = 0)$ から $\bar{u}_s u_s = u^{(+)\dagger}u^{(+)} > 0$．同様に，$\gamma^0 v_s = -v_s(v_s^{(+)} = 0)$ から $\bar{v}_s v_s = -v_s^{(-)\dagger}v_s^{(-)} < 0$．従って，$u_s, v_s$ のローレンツ不変な規格化を，

$$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})u_{s'}(\boldsymbol{k}) = -\bar{v}_s(\boldsymbol{k})v_{s'}(\boldsymbol{k}) = \delta_{ss'} \qquad (2.167)$$

と置くことができる．この規格化に伴って，

$$u_s^\dagger(\boldsymbol{k})u_{s'}(\boldsymbol{k}) = v_s^\dagger(\boldsymbol{k})v_{s'}(\boldsymbol{k}) = \frac{E_k}{mc^2}\delta_{ss'} \qquad (2.168)$$

も導かれる．以上の (u_s, v_s) の直交性と規格化を基に，量子化されたディラック場 $\hat{\psi}$ のハミルトニアンを $(\hat{b}_s, \hat{d}_s)$ で書き下すことができる．その際，量子化に伴い演算子の順序が意味を持つことを考慮して，ローレンツ共変な順序を保つ形で (2.165) を $\mathcal{H}$ に代入すると

$$\hat{\mathscr{H}} = \int dV \hbar\hat{\psi}^\dagger i\partial_t\hat{\psi} = \sum_{s,s'}\int \frac{d^3kd^3k'}{(2\pi)^3}\frac{mc^2}{\sqrt{E_kE_k'}}$$
$$\times\left(\hat{b}_s^\dagger u_s^\dagger e^{ik\cdot x} + \hat{d}_s v_s^\dagger e^{-ik\cdot x}\right)\times E_{k'}\left(\hat{b}_s' u_s' e^{-ik'\cdot x} - \hat{d}_s' v_s' e^{ik'\cdot x}\right)$$
$$= \sum_s\int d^3kE_k\left(\hat{b}_s^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{b}_s(\boldsymbol{k}) - \hat{d}_s(\boldsymbol{k})\hat{d}_s^\dagger(\boldsymbol{k})\right) \qquad (2.169)$$

が得られる．ハミルトニアン (2.169) は，正定値な形にはなっていない．しかし $(\hat{b}_s, \hat{d}_s)$ の量子化が，スカラー場やシュレディンガー場と異なり反交換関係

$$\{\hat{b}_s(\boldsymbol{k}), \hat{b}_{s'}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \{\hat{d}_s(\boldsymbol{k}), \hat{d}_{s'}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \delta_{ss'}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'), \qquad (2.170)$$
$$\{\hat{b}_s(\boldsymbol{k}), \hat{b}_{s'}(\boldsymbol{k}')\} = \{\hat{d}_s(\boldsymbol{k}), \hat{d}_{s'}(\boldsymbol{k}')\} = 0 \qquad (2.171)$$

であるとすれば，$\hat{d}_s(\boldsymbol{k})\hat{d}_s^\dagger(\boldsymbol{k}) = -\hat{d}_s^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{d}_s^\dagger(\boldsymbol{k}) + \delta^{(3)}(0)$ と書き換えることができる．そこで，c-数の無限大を除いた形を改めて自由場のハミルトニアンと定義すると，正定値な表式

$$\mathscr{H}_0 = \sum_s \int d^3k E_k \left(\hat{b}_s^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{b}_s(\boldsymbol{k}) + \hat{d}_s^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{d}_s(\boldsymbol{k})\right) \tag{2.172}$$

に至る．また，$\hat{\psi}$ の $e^{\mp ik\cdot x}$ を含む項をそれぞれ $\psi^{(\pm)}$ と記せば，$\sum_s u_s u_s^\dagger = \frac{\hbar \not{k}+mc}{2mc}\gamma^0$, $\sum_s v_s v_s^\dagger = \frac{\hbar\not{k}-mc}{2mc}\gamma^0$ に注意して，

$$\{\hat{\psi}^{(+)}(\boldsymbol{r},t), \hat{\psi}^{(+)\dagger}(\boldsymbol{r}',t)\} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \frac{mc^2}{E_k} \frac{\hbar\not{k}+mc}{2mc}\gamma^0,$$
$$\{\hat{\psi}^{(-)}(\boldsymbol{r},t), \hat{\psi}^{(-)\dagger}(\boldsymbol{r}',t)\} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} e^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \frac{mc^2}{E_k} \frac{\hbar\not{k}-mc}{2mc}\gamma^0$$

を得る．第 2 式で $\boldsymbol{k} \to -\boldsymbol{k}$ と置き換えて第 1 式に加えると，

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{r}',t)\} = \boldsymbol{I}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'), \quad (\boldsymbol{I}: 4\times 4 \text{単位行列}) \tag{2.173}$$

が得られる．$\hat{\psi}$ の正準共役量は $\hat{\pi} = i\hbar\hat{\psi}^\dagger$ であったから，(2.173) は正準交換関係を反交換関係で置き換えた $\{\hat{\psi}(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}(\boldsymbol{r}',t)\} = \boldsymbol{I}i\hbar\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ に他ならない．反交換関係による量子化の下では，真空は単に $\hat{b}_s|0\rangle = \hat{d}_s|0\rangle = 0$, ($\langle 0|0\rangle = 1$) で定義される状態であり，空孔解釈を必要としない．また，$\hat{b}_s^{\dagger 2} = \hat{d}_s^{\dagger 2} = 0$ により同じ量子数の状態を 2 度以上励起することはできず，電子のフェルミ統計が自然に取り入れられるのである．

練習問題 2.7.2

u, v の規格化 (2.168) を確かめよ．

解答 $u_s^\dagger u_{s'} = 0, (s \neq s')$ は明らか．一方，$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})\gamma^\mu u_s(\boldsymbol{k})$ は k^μ から構成される 4 次元ベクトルであり，k^μ 自身に比例して $\bar{u}_s(\boldsymbol{k})\gamma^\mu u_s(\boldsymbol{k}) = Ak^\mu$ と書ける．$\not{k}u_s = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)u_s$, $k^2 = \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2$, $\bar{u}u = 1$ 等に注意すると，$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})\not{k}u_s(\boldsymbol{k}) = \left(\frac{mc}{\hbar}\right) = A\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2$ から $A = \frac{\hbar}{mc}$ と決まる．従って，$\bar{u}_s(\boldsymbol{k})\gamma^0 u_s(\boldsymbol{k}) = u_s^\dagger(\boldsymbol{k})u_s(\boldsymbol{k}) = \frac{\hbar}{mc}k^0 = \frac{\hbar}{mc}\frac{E}{\hbar c} = \frac{E}{mc^2}$ となる．$v_s^\dagger v_{s'}$ の規格化も，同様の手順で求まる．□

練習問題 2.7.3

$\sum_s u_s u_s^\dagger = \frac{\hbar\not{k}+mc}{2mc}\gamma^0$, $\sum_s v_s v_s^\dagger = \frac{\hbar\not{k}-mc}{2mc}\gamma^0$ を確かめよ．

解答 4×4 行列 $\Lambda_{(+)} \equiv \sum_s u_s\bar{u}_s$ は，$(\hbar\not{k}-mc)\Lambda_{(+)} = 0$, $\Lambda_{(+)}^2 = \Lambda_{(+)}$ を満たす．そこで $\Lambda_{(+)} = C(\hbar\not{k}+mc)$ と置くと，$\Lambda_{(+)}^2 = C^2(2mc)(\hbar\not{k}+mc) = C(\hbar\not{k}+mc)$ から $C = (2mc)^{-1}$ となり，$\sum_s u_s u_s^\dagger = \Lambda_{(+)}\gamma^0 = \frac{\hbar\not{k}+mc}{2mc}\gamma^0$ を得る．同様に，$\sum_s v_s\bar{v}_s = \frac{\hbar\not{k}-mc}{2mc}$ を得て，右から γ^0 を乗じて求める形となる．□

[2.7.4-C] 電磁場

マクスウェルにより完成された電磁場の理論は，相対論と整合して光速 c を普遍定数として含むものの，$\hbar$ の現れない純然たる古典場の理論である．しかし，その量子場は量子力学の発端とも言える輻射場であり，またゲージ理論と呼ばれる理論形式の基本形ともなっている．

真空中の電場 $\boldsymbol{E}$ と磁束密度 $\boldsymbol{B}$ は，3 次元空間の 2 組のベクトル場で，$(\rho, \boldsymbol{J})$ を場の源となる（電荷密度，電流密度）として，マクスウェル方程式*19)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = \rho, \qquad \nabla \times \boldsymbol{B} = \boldsymbol{J} + \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}, \tag{2.174}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0, \qquad \nabla \times \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \tag{2.175}$$

を満たす．このうち (2.175) は，スカラーポテンシャル ϕ およびベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を用いて $\boldsymbol{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c}\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t}$ および $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ と置くことにより恒等式となる．一方 (2.174) は場の運動方程式に対応し，ポテンシャル場を用いて $\Box\phi = \rho$ および $\Box\boldsymbol{A} = \boldsymbol{J}$ と表される．マクスウェル方程式は，4 次元ポテンシャル $(A^\mu) = (\phi, \boldsymbol{A})$，4 次元電流密度 $(J^\mu) = (\rho, \boldsymbol{J})$ を導入し，電磁場テンソル

$$F^{\mu\nu} = \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu, \qquad \tilde{F}_{\mu\nu} = \frac{1}{2}\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{\rho\sigma} \tag{2.176}$$

を定義すると*20)，

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = J^\nu, \qquad \partial^\mu \tilde{F}_{\mu\nu} = 0 \ (\text{恒等式}) \tag{2.177}$$

の形に表される．$F^{\mu\nu}$ は電磁場テンソル，$\tilde{F}_{\mu\nu}$ はその双対テンソルと呼ばれるが，これらは定義により**ゲージ変換**

$$\boxed{A^\mu \to A^\mu + \partial^\mu f} \tag{2.178}$$

の下で不変で，ポテンシャル (A^μ) には見かけの自由度がある．そこで電磁場（この意味で**ゲージ場**）を含む理論では，見かけの自由度に依存しないための，ゲージ変換 (2.178) の下での不変性が要求される．

このような電磁場のラグランジアン密度*21)は，J^μ を外部（保存）電流として，

$$\mathcal{L} = \underbrace{-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}}_{\mathcal{L}_A = \frac{1}{2}(\boldsymbol{E}^2 - \boldsymbol{B}^2)} - J_\mu A^\mu \tag{2.179}$$

*19) 電磁気学の単位系は，ヘビサイド–ローレンツ有理化単位系を用いる．

*20) $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$, ($\epsilon_{0123} = 1$) は 4 階の完全反対称テンソルで，$\tilde{F}_{01} = F^{23}, \tilde{F}_{12} = F^{30}$ 等を導く．$F^{\mu\nu}, \tilde{F}_{\mu\nu}$ は $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ を使って $(F^{0i}, F^{ij}) = -(E_i, B_k)$, $(\tilde{F}_{0i}, \tilde{F}_{ij}) = -(B_i, E_k)$, $(i, j, k = 1, 2, 3$ 循環的) と表され，$F, \tilde{F}$ で $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ の役割が入れ替わる．

*21) A_μ の次元は，$S[A] = \int d^4\Omega\mathcal{L}$, $(d^4\Omega = dtdV)$ が作用となるように選んでいる．

が可能である．このとき，(2.177) は $\mathcal{L}$ から A^μ の運動方程式として得られるが，$\pi_\mu \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{A}^\mu} = -cF_{0\mu}$ のため，正準形式は見かけ上の相対論的共変性を損なう拘束条件 $\pi_0 = 0$ を伴う[*22)]．これを回避するために，パラメーター α を含む作用

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_\alpha &= -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha}\left(\partial_\mu A^\mu\right)^2 - J^\mu A_\mu \\ &\cong -\frac{1}{2}\left(\partial_\mu A_\nu\right)\left(\partial^\mu A^\nu\right) - \frac{1}{2}\left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)(\partial \cdot A)^2 - J^\mu A_\mu \end{aligned} \tag{2.180}$$

も用いられる．ここで，$\cong$ は完全微分項を無視した等式で，力学的に等価なものを表す．この作用の場合は，A^μ の正準共役運動量に拘束条件は現れず $\pi_\mu = -\frac{1}{c}\left\{\partial_0 A_\mu + \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)\delta_\mu^0(\partial \cdot A)\right\}$ と決まり，場の運動方程式は

$$\left\{\partial^2 \delta_\mu^\nu - \left(1 - \frac{1}{\alpha}\right)\partial^\nu \partial_\nu\right\} A^\mu = J^\nu \tag{2.181}$$

となる．これから，場の運動方程式の逆演算 $A^\mu = \hat{G}^{\mu\nu} J_\nu$ を与えるグリーン関数が，$\alpha(\neq \infty)$ に依存して求まる．また，保存電流 $\partial_\mu J^\mu = 0$ に対して $\partial^2(\partial \cdot A) = 0$ が導かれ，$(\partial \cdot A)$ は相互作用があるときも自由場の方程式を満たす．そこで，何らかの意味で補助条件 $(\partial \cdot A) = 0$[*23)] を付加することができれば，$\mathcal{L}_\alpha$ と $\mathcal{L}_0$ は等価な記述を与えることになる．

1950 年に，グプタ-ブリューラーは $\alpha = 1$ のファインマンゲージの下に，電磁場の量子化の有効な手法を与えた．このとき，$\pi_\mu = -\frac{1}{c}\partial_0 A_\mu$ であり，自由場のハミルトニアン密度は

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2}\left\{c^2 \pi_\mu \pi^\mu + (\nabla A_\mu)\cdot(\nabla A^\mu)\right\} \tag{2.182}$$

となる．この形から，自由場は本質的に無限自由度の調和振動子系であるが，4 次元ベクトルの $\mu = 0$ 成分から負エネルギーが励起される．ただし，この段階ではまだ補助条件は考慮されていない．

次に，自由場の運動方程式が $\partial^2 A_\mu = 0$ であることを考慮し，$k^0 = |\boldsymbol{k}|$，$\omega(\boldsymbol{k}) = ck^0$ として平面波展開

$$A_\mu(x) = \sqrt{\hbar c}\int \frac{d^3k}{\sqrt{(2\pi)^3 2k^0}}\left(a_\mu(\boldsymbol{k})e^{-ik\cdot x} + a_\mu^*(\boldsymbol{k})e^{ik\cdot x}\right) \tag{2.183}$$

を行い，量子場に移行してハミルトニアン演算子 $\hat{\mathscr{H}} = \int dV \hat{\mathcal{H}}$ を求めると，

$$\hat{\mathscr{H}} = -\frac{1}{2}\int d^2k \hbar\omega(\boldsymbol{k})\left(\hat{a}_\mu(\boldsymbol{k})\hat{a}^{\dagger\mu}(\boldsymbol{k}) + \hat{a}_\mu^\dagger(\boldsymbol{k})\hat{a}^\mu(\boldsymbol{k})\right) \tag{2.184}$$

となる．ここで，正準交換関係 $[\hat{A}_\mu(\boldsymbol{r},t), \hat{\pi}_\nu(\boldsymbol{r}',t)] = -i\hbar\eta_{\mu\nu}\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ を導

---

*22) 視点を変えていえば，場の方程式 $\partial_\mu F^{\mu\nu} = (\partial^2\delta_\mu^\nu - \partial^\nu\partial_\mu)A^\mu = J^\nu$ は，$\partial^\mu(\partial^2\delta_\mu^\nu - \partial^\nu\partial_\mu) = 0$ であるため，付加的な条件なしに A^μ を J^μ で解けない．

*23) この形の補助条件は，ローレンツ条件と呼ばれる．

く $\hat{a}_\mu(\boldsymbol{k}), \hat{a}^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}')$ の交換関係

$$\begin{aligned}&[\hat{a}_\mu(\boldsymbol{k}), \hat{a}^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}')] = -\eta_{\mu\nu}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'),\\&[\hat{a}_\mu(\boldsymbol{k}), \hat{a}_\mu(\boldsymbol{k}')] = [\hat{a}^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}), \hat{a}^\dagger_\mu(\boldsymbol{k}')] = 0\end{aligned} \tag{2.185}$$

を設定すると，$\hat{a}_i(\boldsymbol{k})$, $\hat{a}^\dagger_i(\boldsymbol{k})$ はそれぞれ消滅演算子，生成演算子の意味を持つ．そこで，真空状態を $\hat{a}_\mu(\boldsymbol{k})|0\rangle = 0$, $(\langle 0|0\rangle = 1)$ と定義し，自由場のハミルトニアンを改めて $\hat{\mathscr{H}}_0 = \hat{\mathscr{H}} - \langle 0|\hat{\mathscr{H}}|0\rangle$ と置くと，

$$\hat{\mathscr{H}}_0 = \int d^2k\hbar\omega(\boldsymbol{k})\left\{-\hat{a}^{0\dagger}(\boldsymbol{k})\hat{a}^0(\boldsymbol{k}) + \hat{a}^{i\dagger}(\boldsymbol{k})\hat{a}^i(\boldsymbol{k})\right\} \tag{2.186}$$

となる．この場合，$\hat{\mathscr{H}}_0\hat{a}^{\dagger\mu}(\boldsymbol{k})|0\rangle = \hbar\omega(\boldsymbol{k})\hat{a}^{\dagger\mu}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ で，ベクトル状態 $\hat{a}^{\dagger\mu}(\boldsymbol{k})|0\rangle$ $(\mu = 0,1,2,3)$ のどの成分も正定値の固有値 $\hbar\omega(\boldsymbol{k})$ に属するが，$-\langle 0|\hat{a}^0(\boldsymbol{k})\hat{a}^{\dagger 0}(\boldsymbol{k}')|0\rangle = \langle 0|\hat{a}^i(\boldsymbol{k})\hat{a}^{\dagger i}(\boldsymbol{k}')|0\rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ で，$\hat{a}^{\dagger 0}(\boldsymbol{k})$ は非物理的な負ノルムのゴースト状態を生成する．

従って，このようなゴースト状態を何らかの条件で排除しなくてはならないが，考えられる補助条件 $(\partial\cdot\hat{A})(x) = 0$ は，$[\hat{\pi}_\mu(x), (\partial\cdot\hat{A})(x')] = -i\hbar\partial'^\mu\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \neq 0$ のため正準交換関係と矛盾する．そこで，グプターブリューラーは補助条件を期待値 $\langle\Phi|(\partial\cdot\hat{A})(x)|\Phi\rangle = 0$ で理解し，その十分条件である正振動数部分を用いた $(\partial\cdot\hat{A})^{(+)}|\Phi\rangle = 0$ あるいは $k_\mu\hat{a}^\mu(\boldsymbol{k})|\Phi\rangle = 0$ を，状態に対する補助条件と考えることを提案した．すると，例えば $\boldsymbol{k} = k^0\boldsymbol{e}_3$ であれば $k\cdot\hat{a} = k^0(\hat{a}_0 - \hat{a}_3)$ となり，$\hat{a}^\dagger_i$, $(i=1,2)$ および $\hat{a}^\dagger_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{a}^\dagger_0 - \hat{a}^\dagger_3)$ が補助条件と矛盾しない物理的状態を生成できる．このとき，$\|\hat{a}^\dagger_-|0\rangle\|^2 = 0$ から分かるように，$\hat{a}^\dagger_-$ は観測されない 0-ノルムの状態を生成し，$\hat{a}^\dagger_1$, $\hat{a}^\dagger_2$ の 2 成分が，物理的で正定値ノルムを持つ状態を生成し，この状態の下でハミルトニアン演算子 (2.186) の固有値も正定値となる．

さて，電磁場 (2.179) とスカラー場 (2.131) から生成される保存電流 $J_\mu = ec\psi^* i\overleftrightarrow{\partial_\mu}\psi$ との相互作用項 $ce\left(\psi i\overleftrightarrow{\partial_\mu}\psi\right)A^\mu$ を含む合成系の作用

$$\mathcal{L}_{A+\psi} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \hbar c^2\left\{(D_\mu\psi)^*(D^\mu\psi) - \left(\frac{mc}{\hbar^2}\right)^2\psi^*\psi\right\} \tag{2.187}$$

を考える．ここで，D_μ は共変微分演算子

$$D_\mu\psi \equiv \left(\partial_\mu - i\frac{e}{\hbar c}A_\mu\right)\psi \tag{2.188}$$

である．このとき，ゲージ変換 (2.178) の下での理論の不変性，従って作用の不変性が保たれるためには，変換と同時に ψ の位相変換

$$\boxed{\psi \to e^{i\frac{e}{\hbar c}f}\psi} \tag{2.189}$$

を実行すればよい．このとき，$D_\mu\psi \to e^{i\frac{e}{\hbar c}f}D_\mu\psi$ と変換され，$\mathcal{L}$ は不変となる．逆に，任意関数 $f(x)$ を用いた物質場の位相変換の下で作用が不変となる

ためには，共変微分を通して生じた電流とゲージ場との相互作用が必要となる．

以上に述べた，シュレディンガー場，クライン–ゴルドン場，ディラック場，古典的な電磁場は，何れも前章で量子力学のシュレディンガー方程式を書き下した際の，力学変数 $\{q_i\}$ を無限自由度に拡張したものに相当する．一方，確率解釈を伴う波動関数 Ψ は，場のハミルトニアン演算子 $\hat{\mathscr{H}}$ を用いたシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle = \hat{\mathscr{H}}|\Psi\rangle \tag{2.190}$$

の解に対応する．解である Ψ の中には，それぞれの場が表す粒子状態を多体化した構造や，様々な粒子間の相互作用が取り込まれている．

練習問題 2.7.4

電磁場 A^μ と複素スカラー場 $(C, \bar{C})$ の複合系の作用（意味は，後の章で明らかにされる）

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} - \frac{1}{2}(\partial\cdot A)^2 - \partial_\mu\bar{C}\partial^\mu C \tag{2.191}$$

を考える．2 種類の場に相互作用は無くそれぞれに自由場で，場の運動方程式 $\partial^2 C = \partial^2\bar{C} = 0$ および $\partial^2 A_\mu = 0\,(\to \partial^2(\partial\cdot A) = 0)$ を満たす．このとき，ϵ を無限小パラメーターとする変換

$$\delta A_\mu = \epsilon\partial_\mu C\,, \quad \delta\bar{C} = \epsilon(\partial\cdot A)\,, \quad \delta C = 0 \tag{2.192}$$

の下で，$\delta\mathcal{L} =$ (完全微分) となることを確かめよ．

解答 場の運動方程式を使った等式を $\simeq$ で表すと，

$$\begin{aligned}
\delta\left(-\frac{1}{4}F^{\mu\nu}_{\mu\nu}\right) &= -\left(\partial_\mu\delta A_\nu\right)F^{\mu\nu} = -\epsilon(\partial_\mu\partial_\nu C)F^{\mu\nu} = 0,\\
\delta\left(-\frac{1}{2}(\partial\cdot A)^2\right) &= -(\partial_\mu\delta A^\mu)(\partial\cdot A) = -\epsilon(\partial^2 C)(\partial\cdot A) \simeq 0,\\
\delta\left(-\partial_\mu\bar{C}\partial^\mu C\right) &= -\left(\partial_\mu\delta\bar{C}\right)\partial^\mu C = -\epsilon\big(\partial_\mu(\partial\cdot A)\big)\partial^\mu C\\
&\simeq \partial_\mu\left\{-\epsilon(\partial\cdot A)(\partial^\mu C)\right\}.
\end{aligned}$$

従って，$\delta\mathcal{L} \simeq \epsilon\partial_\mu\left\{-(\partial\cdot A)(\partial^\mu C)\right\}$ となる．□

練習問題 2.7.5

場の変数 $q_i(x)$ の微分 $\partial_\mu q_i(x)$ のみを含むラグランジアン密度 $\mathcal{L}(\partial q_i(x))$ に対し，オイラー–ラグランジュの運動方程式は，

$$\begin{aligned}
\delta\mathcal{L} &= \sum_i \delta(\partial_\mu q_i)\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial q_i)} = \sum_i\left[\partial_\mu\left\{\delta q_i\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial q_i)}\right\} - \delta q_i\partial_\mu\left\{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu q_i)}\right\}\right]\\
&\simeq \partial_\mu\left[\sum_i\left\{\delta q_i\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial q_i)}\right\}\right]
\end{aligned}$$

を導く．この式を練習問題 2.7.4 のラグランジアン密度に適用して，右辺を (2.192) の変化分の下で計算せよ．

解答 (2.192) の形から，

$$\sum_i \delta q_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu q_i)} = \delta A_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu A_\nu)} + \delta \bar{C} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \bar{C})}$$
$$= \epsilon(\partial_\nu C)\{-F^{\mu\nu} - \eta^{\mu\nu}(\partial \cdot A)\} - \epsilon(\partial \cdot A)\partial^\mu C$$
$$= \epsilon\{-(\partial_\nu C)F^{\mu\nu} - 2(\partial \cdot A)\partial^\mu C\}.$$

従って，$\delta\mathcal{L} = \epsilon\partial_\mu\{-C(\partial_\nu)F^{\mu\nu} - 2(\partial \cdot A)\partial^\mu C\}$ である．□

注）練習問題 2.7.4 の結果を $\delta\mathcal{L} = \epsilon\partial_\mu J^\mu_{\mathrm{BRS}}$ と書いて定義される J^μ_{BRS} を BRS 電流，また練習問題 2.7.5 の結果を $\delta\mathcal{L} = \epsilon\partial_\mu J^\mu_{\mathrm{N}}$ と書いて定義される J^μ_{N} をネーター電流と呼ぶ．$\delta\mathcal{L}$ は共通なので，

$$J^\mu = J^\mu_{\mathrm{N}} - J^\mu_{\mathrm{BRS}} = -(\partial_\nu C)F^{\mu\nu} - (\partial^\mu C)(\partial \cdot A)$$
$$\simeq -\partial_\nu(CF^{\mu\nu}) + C\overleftrightarrow{\partial}^\mu(\partial \cdot A) \tag{2.193}$$

は，運動方程式を使って $\partial_\mu J^\mu \simeq 0$ を満たす保存流である．

練習問題 2.7.6

$C, \bar{C}$ が複素共役の下で $C(x)^* = C(x)$, $\bar{C}(x)^* = -\bar{C}(x)^*$ を満たし，フェルミ統計の性質 $\{C(x), C(x')\} = \{\bar{C}(x), \bar{C}(x')\} = \{C(x), \bar{C}(x')\} = 0$ を持つ，ゴースト場であるとする．このとき，$\Pi = \partial_0\bar{C}$ は C に共役な運動量となり，また運動方程式 $\partial^2 C = \partial\bar{C} = 0$ から，C, $\bar{C}$ は A_μ と同様に

$$C(x) = \int d^3k\,(f_k(x)\alpha(\boldsymbol{k}) + f_k^*(\boldsymbol{k})\alpha^*(\boldsymbol{k})),$$
$$\bar{C}(x) = \int d^3k\,(f_k(x)\beta(\boldsymbol{k}) - f_k^*(\boldsymbol{k})\beta^*(\boldsymbol{k})),$$
$$\left(f_k(x) = \frac{e^{-ik\cdot x}}{\sqrt{(2\pi)^3 2k^0}}\right)$$

と展開できる．この系を量子場に移行した場合，反交換関係

$$\{\hat{\Pi}(x), \hat{C}(x'\}\Big|_{x^0=x'^0} = i\delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$$

が

$$\{\hat{\alpha}(\boldsymbol{k}), \hat{\beta}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \{\hat{\beta}(\boldsymbol{k}), \hat{\alpha}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'),$$
$$\{\hat{\alpha}(\boldsymbol{k}), \hat{\alpha}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = \{\hat{\beta}(\boldsymbol{k}), \hat{\beta}^\dagger(\boldsymbol{k}')\} = 0$$

から導かれることを確かめよ．

解答 $\hat{\Pi}(x) = i\int d^3k k^0(f_k(x)\hat{\beta}(\boldsymbol{k}) + f_k^*(x)\hat{\beta}^\dagger(\boldsymbol{k}))$ に注意して，

$$\{\hat{\Pi}(x), \hat{C}(x')\}\Big|_{x^0=x'^0} = i\int d^3k k^0 \int d^3k'$$
$$\times \{f_k(x)\hat{\beta}(\boldsymbol{k}) + f_k^*(x)\hat{\beta}^\dagger(\boldsymbol{k}),\ f_k(x)\alpha(\boldsymbol{k}) + f_k^*(\boldsymbol{k})\alpha^*(\boldsymbol{k})\}$$
$$= i\int d^3k k^0 \frac{2e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{(2\pi)^3 2k^0}\delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = i\delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'). \quad \square$$

練習問題 2.7.7

以上の量子場 $\hat{C}$, $\hat{\bar{C}}$ および $\hat{A}_\mu$ の展開形を基に，(2.193) から定義される電荷 $\hat{Q}_B = \int dV \hat{J}^0$ を場の展開係数(生成消滅演算子)で表し，$\hat{Q}_B^2 = 0$ を確かめよ．

解答 体積積分の下で，$\partial_i(\cdots)$ 項は無視できるので

$$\hat{Q}_B = \int dV \left\{-\partial_i\left(\hat{C}\hat{F}^{0i}\right) + \hat{C}\overleftrightarrow{\partial}^0(\partial\cdot\hat{A})\right\} = \int dV \hat{C}\overleftrightarrow{\partial}^0(\partial\cdot\hat{A})$$
$$= -\int d^3k \int d^3k' \left(f_k(x)\hat{\alpha}(\boldsymbol{k}) + f_k^*(x)\hat{\alpha}^\dagger(\boldsymbol{k})\right)$$
$$\times i\overleftrightarrow{\partial}^0 \left\{f_{k'}(x)(k'\cdot\hat{a}(\boldsymbol{k}')) - f_{k'}^*(x)(k'\cdot\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{k}'))\right\}.$$

ここで，$\int dV f_k i\overleftrightarrow{\partial}^0 f_{k'} = \int dV f_k^* i\overleftrightarrow{\partial}^0 f_{k'}^* = 0, \int dV f_k^* i\overleftrightarrow{\partial}^0 f_{k'} = \delta^{(3)}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ 等に注意すれば，最終的に

$$\hat{Q}_B = \int d^3k \left\{\hat{\alpha}(\boldsymbol{k})(k\cdot\hat{a}^\dagger(\boldsymbol{k})) + \hat{\alpha}^\dagger(\boldsymbol{k})(k\cdot\hat{a}(\boldsymbol{k}))\right\}$$

となる．この形と $\hat{\alpha}, \hat{\alpha}^\dagger$ の代数から，$\hat{Q}_B^2 = 0$ は明らかである．□

注）$C, \bar{C}$ はスピンと統計の関係に反する粒子の場で，ファデーエフ–ポポフのゴースト場と呼ばれる．電磁場の量子化の例では，物理的状態 $\Psi_{\rm phys}$ がゴースト状態を含まないように $\hat{\alpha}|\Psi_{\rm phys}\rangle = \hat{\beta}|\Psi_{\rm phys}\rangle = 0$ を要請し，さらに拘束条件 $\hat{Q}_B|\Psi_{\rm phys}\rangle = 0$ を置けば，物理的状態は $(\partial\cdot A)^{(+)}|\Psi_{\rm phys}\rangle = 0$ を満たすことになり，グプタ–ブリューラーの理論と同等になる．

以上は，自由場でしかもゲージ構造の簡単な電磁場の例であるが，ファデーエフ–ポポフのゴースト場を導入するゲージ場の量子化自体は相互作用のある非可換ゲージ場の理論にも適用可能である．また，物理的状態を取り出す上で本当に必要な条件は $\hat{Q}_B|\Psi_{\rm phys}\rangle = 0$ だけでよく，“ゴースト状態を含まない”と言う付加条件すら不要であることが明らかにされている[12]．

第 3 章

行列力学と固有値問題

物理量に対応する演算子の固有値問題を，行列（演算子）の代数的構造から求める考え方を述べる．ここでは，群論的な手法と共に，量子力学の応用の早い時期から知られていた因数分解法を紹介し，現代的な話題と関連する超対称量子力学との関連を探る．

3.1 ハミルトニアンの対称性と保存量

行列力学は，ハイゼンベルクにより発見され，ボルン–ヨルダン等により整備された量子力学の出発点にある手法である．その基本となるハイゼンベルクの運動方程式 (2.2) によれば，保存量となる物理量の演算子 $\hat{G}\,(=\hat{G}^\dagger)$ は，

$$\frac{d}{dt}\hat{G}(t) = \frac{1}{i\hbar}[\hat{G}(t), \hat{H}] = \frac{1}{i\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}[\hat{G}, \hat{H}]e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = 0 \tag{3.1}$$

を満たし，$[\hat{G}, \hat{H}] = 0$ である．このとき，$\hat{G}$ を生成子とする無限小（ユニタリ）変換の下で，任意の演算子は

$$\hat{A}' = e^{i\epsilon\hat{G}}\hat{A}e^{-i\epsilon\hat{G}} \simeq \hat{A} + \delta\hat{A}\,,\ (\,\delta\hat{A} = i\epsilon[\hat{G}, \hat{A}]\,) \tag{3.2}$$

$(\epsilon \ll 1)$ の変換を受け，ハミルトニアン演算子 $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$ は，

$$\hat{H}'(\hat{q}', \hat{p}') = e^{i\epsilon\hat{G}}\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})e^{-i\epsilon\hat{G}} = \hat{H}(\hat{q} + \delta\hat{q}, \hat{p} + \delta\hat{p}) \tag{3.3}$$

と変換される．従って，$\hat{G}$ がハミルトニアンと可換な保存量で $\hat{H}' = \hat{H}$ となれば，ハミルトニアンは $\hat{G}$ による変換の下で**不変 = 対称**と言うことになる*1)．例として，$\hat{G} = \hat{p}$ の場合を考えれば，$\delta\hat{q} = \epsilon\hbar,\ \delta\hat{p} = 0$ であり，運動量は平行移動の生成子の意味を持つ．この変換の下で不変なハミルトニアンは，自由粒子の $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$ であり，このハミルトニアンによる運動方程式から運動量の

*1) これは，古典力学において対称性と保存量を関係づける，ネーターの定理の量子力学的表現である．

保存量であることが導かれる．また，水素型原子模型のように回転対称な系であれば，回転の生成子である角運動量は保存量となる，等々である．

一般に $\hat{G}$ が保存量でハミルトニアン $\hat{H}$ と可換であれば，$\hat{H}$ の固有状態 $\hat{H}|\psi_{E,i}\rangle = E|\psi_{E,i}\rangle$ に対し $\hat{G}|\psi_{E,i}\rangle$ は同じエネルギー固有値 E に属し，エネルギーは縮退する．そこで，演算子 $\hat{G}$ は $\hat{G}|\psi_{E,i}\rangle = \sum_j |\psi_{E,j}\rangle G_{ji}$, ($G_{ji} = \langle\phi_{E,j}|\hat{G}|\phi_{E,i}\rangle$) のような行列表現 (G_{ij}) を持ち，表現次元は縮退の大きさに関係する．水素型原子模型における角運動量演算子が，与えられたエネルギーの下で有限次元の行列に表されるのは，この意味である．さて，このような保存量の行列表現は，エネルギー固有値に関しては対角形であり，行列要素は $\langle\phi_{E',i}|\hat{G}|\phi_{E,j}\rangle = 0$ ($E' \neq E$) となって異なるエネルギー間の遷移を生じない．これが，観測量に結び付く行列要素を基に保存量を考える量子力学発見当初の考え方であり，ハミルトニアン自身にも適用される．

例として，ハミルトニアン (2.95) で記述される調和振動子系を考え，エネルギーの固有状態 $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ による位置の演算子 $\hat{q}$ の行列要素を，

$$q_{nm}(t) = \langle E_n|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|E_m\rangle = e^{i\omega_{nm}t}q_{nm} \tag{3.4}$$

と表す．ただし，$\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$ および $q_{nm} = \langle E_n|\hat{q}|E_m\rangle$ である．系の運動方程式は，古典と量子の何れの場合も $\ddot{q} + \omega^2 q = 0$ であり，これを上記の行列要素で書くと，

$$\left[\omega_{nm}^2 - \omega^2\right] q_{nm} = 0 \tag{3.5}$$

となる．これから，$q_{nm} \neq 0$ が許されるのは $\omega_{nm} = \pm\omega$，即ち $E_n = E_m \pm \hbar\omega$ の場合である．そこで，このような量子数 m を改めて $m = n \pm 1$，また基底状態のエネルギーを E_0 とすれば，$E_n = E_0 + n\hbar\omega$ となる．次に，$p = m\dot{q}$ としてハミルトニアン (2.95) を行列要素で表して $t = 0$ と置くと，

$$H_{nm} = \frac{m}{2}\sum_k \left[-\omega_{nk}\omega_{km} + \omega^2\right] q_{nk}q_{km} \tag{3.6}$$

が得られる．ここに，上の量子数の構造 $\omega_{nm} = \omega(\delta_{m,n+1} - \delta_{m,n-1})$ を代入すると，$H_{nm} = 0$ $(n \neq m)$ となり，エネルギーは保存する．さらに，正準交換関係の行列要素表示を使うと，E_0 の形を決定することもできる．以上は完成された量子力学を知った上での議論であるが，ハイゼンベルク，ボルン–ヨルダンらが行列力学を発見する過程では，ハミルトニアンが対角形になりエネルギーが保存すること自体，手探りで確認すべき問題であった．

練習問題 3.1.1

1 次元自由粒子のハミルトニアンを $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m}\hat{p}^2$ とする．このとき，ハイゼンベルク表示の正準変数を用いて時刻 t の粒子位置の演算子 $\hat{q}(t)$ の固有状態 $\hat{q}(t)|q,t\rangle = q|q,t\rangle$ を解き，遷移の確率振幅 $\langle q,t|q'\rangle$ を決定せよ．

解答 $\hat{A}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0}\hat{A}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0} = \hat{A} + \frac{1}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{A}] + \frac{1}{2!}\frac{i^2}{\hbar^2}[\hat{H}_0, [\hat{H}_0, \hat{A}]] + \cdots$ から,

$$\hat{q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} = \frac{1}{m}\hat{p}t + \hat{q}\,,$$
$$\hat{p}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{p}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} = \hat{p}\,.$$

そこで，シュレディンガー表示の位置の演算子の固有状態 $\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle$ を用いると,

$$\hat{q}(t)|q,t\rangle = \left(\frac{1}{m}\hat{p}t + \hat{q}\right)|q,t\rangle = q|q,t\rangle$$

は，$e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\hat{p}^2 t}\hat{q}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\hat{p}^2 t} = \hat{q} - \frac{1}{m}\hat{p}t$ に注意して $|q,t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\hat{p}^2 t}|q\rangle$ である．従って，時刻 $t=0$ に位置 q' にある粒子が，時刻 $t(>0)$ に位置 q に見出される遷移の確率振幅は

$$\begin{aligned}\langle q,t|q'\rangle &= \langle q|e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2m}\hat{p}^2 t}|q'\rangle = e^{\frac{i\hbar t}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2}}\delta(q-q') \\ &= \int \frac{dk}{2\pi}e^{ik(q-q')-\frac{i\hbar t}{2m}k^2} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar t}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q-q')^2}{t}} \end{aligned} \tag{3.7}$$

となる．得られた結果は，$\delta(q-q')$ を $t=0$ の初期状態とする時間に依存するシュレディンガー方程式の解（波動関数）であり，$(\hat{q}(t), \hat{p}(t))$ は古典的運動方程式の解と一致しているが，背後にある状態は干渉可能な波である．□

3.2 調和振動子の行列力学

調和振動子は，自明ではないポテンシャルを持つ系でありながら，微分方程式としての波動方程式を経由せず，演算子（行列）の代数構造のみからハミルトニアンの固有状態や固有値を求めることのできる，行列力学の典型的な応用例となっている．

本質は 1 次元の問題で尽きるため，ハミルトニアンが (2.95) で与えられる系を考える．基本となる手法は，正準演算子 $(\hat{q}, \hat{p})$ から,

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger + \hat{a}\right)\,,$$
$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger - \hat{a}\right)$$

あるいは,

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p}\,, \tag{3.8}$$
$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\hat{q} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega}}\hat{p} \tag{3.9}$$

の関係で与えられる，無次元の**振動子変数**（**ボーズ振動子**，**梯子演算子**，**生成**

消滅演算子）$(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ を用いた記述に移ることである．このとき，$(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ の満たす交換関係は

$$\boxed{[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}^\dagger] = 0} \tag{3.10}$$

であり，系のハミルトニアン (2.95) は $\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger\hat{a} + 1$ に注意して

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 = \frac{\hbar\omega}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^\dagger\right) \\ &= \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{3.11}$$

と表される．従って，$\hat{H}$ は**数演算子**と呼ばれる $\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}$ のみの関数であり，$\hat{H}$ の固有値問題は $\hat{N}$ の固有値問題に置き換えられる．

さて，数演算子 $\hat{N}$ は振動子変数 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ との間で，次の代数を満たす．

$$[\hat{N}, \hat{a}] = -\hat{a}, \ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger\,. \tag{3.12}$$

これから，ハイゼンベルク運動方程式の解としての時間に依存する力学変数，即ちハイゼンベルク表示の力学変数が

$$\hat{a}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = e^{-i\omega t}\hat{a}, \ (\,\hat{a}^\dagger(t) = e^{i\omega t}\hat{a}^\dagger\,)\,, \tag{3.13}$$

$$\hat{q}(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} + \hat{a}e^{-i\omega t}\right) = \hat{q}\cos(\omega t) + \frac{1}{m\omega}\hat{p}\sin(\omega t)\,, \tag{3.14}$$

$$\hat{p}(t) = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} - \hat{a}e^{-i\omega t}\right) = \hat{p}\cos(\omega t) - m\omega\hat{q}\sin(\omega t) \tag{3.15}$$

等の形に得られる．この形から，$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m}\hat{p}(t)^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}(t)^2 = \hat{H}$ を確かめるのは単純な計算である．しかし，異なるエネルギー準位間の行列要素が表す力学変数の代数から，ハミルトニアンが時間を含まぬ対角行列になることを示すのは，自明ではない．歴史的には，ハイゼンベルクはこれを確かめて，量子力学（行列力学）の発見を確信したのである．

3.2.1 エネルギーの固有状態と離散完全系

調和振動子のハミルトニアンは $\hat{N}$ の関数であり，その固有値は $\hat{N}$ の固有値問題を解いて得られる．そこでまず，固有状態を $\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$ とおく．このとき，

$$\hat{N}\hat{a}|\lambda\rangle = \left([\hat{N}, \hat{a}] + \hat{a}\hat{N}\right) = \hat{a}(\hat{N} - 1)|\lambda\rangle = (\lambda - 1)\hat{a}|\lambda\rangle\,, \tag{3.16}$$

$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle = \left([\hat{N}, \hat{a}^\dagger] + \hat{a}^\dagger\hat{N}\right) = \hat{a}^\dagger(\hat{N} + 1)|\lambda\rangle = (\lambda + 1)\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle \tag{3.17}$$

を得て，$\hat{a}|\lambda\rangle \propto |\lambda - 1\rangle$, $\hat{a}^\dagger|\lambda\rangle \propto |\lambda + 1\rangle$ が導かれる．この意味で，$\hat{a}$ は λ の値を 1 だけ減ずる消滅演算子であり，$\hat{a}^\dagger$ は 1 だけ増す生成演算子になるが，λ

の値はどこまでも下げることはできない．実際，

$$\|\hat{a}|\lambda\rangle\| = \langle\lambda|\hat{N}|\lambda\rangle = \lambda\langle\lambda|\lambda\rangle \geq 0 \tag{3.18}$$

から，$\lambda = 0$ が可能な下限となり得る．その場合，$\hat{a}|0\rangle = 0$, $\langle 0|0\rangle = 1$ で定義される状態に $\hat{a}^\dagger$ を乗じて励起状態 $|n\rangle = N_n \hat{a}^{\dagger n}|0\rangle$, $(N_n = \text{const.})$ を作り，$\{|n\rangle\,;\, n = 0, 1, 2, \cdots\}$ が完全系を構成することが分かれば，元に戻って状態 $|0\rangle$ が系の基底状態であったことになる．

これを確かめるために，まず励起状態の規格化因子 N_n を求める．これは，$\hat{a}\hat{a}^\dagger = \hat{N} + 1$ に注意すれば，

$$\begin{aligned}
\langle n|n\rangle &= |N_n|^2 \langle 0|\hat{a}^n \hat{a}^{\dagger n}|0\rangle = |N_n|^2 \langle 0|\hat{a}^{n-1}(\hat{N}+1)\hat{a}^{\dagger n-1}|0\rangle \\
&= n|N_n|^2 \langle 0|\hat{a}^{n-1}\hat{a}^{\dagger n-1}|0\rangle \\
&= n(n-1)|N_n|^2 \langle 0|\hat{a}^{n-2}\hat{a}^{\dagger n-2}|0\rangle \\
&\;\vdots \\
&= n!|N_n|^2 \langle 0|0\rangle = n!|N_n|^2 = 1
\end{aligned}$$

から，$N_n = 1/\sqrt{n!}$ と決定される．こうして，$|0\rangle$ に生成演算子を乗じて作られる規格化された状態ベクトルの全体は，

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle\,,\ (n = 0, 1, 2, \cdots), \tag{3.19}$$

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm} \tag{3.20}$$

となる．(3.20)は，$\{|n\rangle\}$ がエルミート演算子 $\hat{N}$ の固有状態であり，エルミート演算子の異なる固有値に属する固有状態が直交することの帰結である．こうして，状態 $\{|n\rangle\}$ が与えるハミルトニアンの固有値の形は

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle\,,$$

ただし

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),\ (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{3.21}$$

と定まる．さらに，状態 $\{|n\rangle\}$ に関する $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ の行列要素は，

$$\begin{aligned}
\hat{a}|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}\hat{a}^{\dagger n}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{N}+1)\hat{a}^{\dagger n-1}|0\rangle \\
&= \sqrt{n}\frac{1}{\sqrt{(n-1)!}}\hat{a}^{\dagger n-1}|0\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle\,,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^{\dagger n+1}|0\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{3.23}$$

から，$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\delta_{m,n-1}$, $\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1}$ の形に求められる．これらの行列要素から，

$$\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| \tag{3.24}$$

に対し，$\langle n|\hat{n} = \langle n+1|\sqrt{n+1}$ に注意して，

$$\begin{aligned}\hat{a}\hat{I} &= \sum_{n=0}^{\infty} \hat{a}|n\rangle\langle n| = \sum_{n=1}^{\infty} |n-1\rangle\langle n|\sqrt{n} = \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m+1|\sqrt{m+1} \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m|\hat{a} = \hat{I}\hat{a}\end{aligned}$$

が得られる．同様に，$\hat{a}^\dagger\hat{I} = \hat{I}\hat{a}^\dagger$ も得られ，$\hat{I}$ は $(\hat{q}, \hat{p})$ の任意関数と可換となって，$\hat{I} = \mathrm{const.} \times$ (単位演算子) が導かれる[*2]．一方，(3.24) より $\hat{I}|0\rangle = |0\rangle$ であり，const. $= 1$ となって $\hat{I}$ は単位行列に帰着する．従って，$\{|n\rangle\}$ は完全系をなし，合わせて $|0\rangle$ が基底状態であることも示された．

練習問題 3.2.1

$\hat{a}^\dagger|\phi\rangle = 0$ を満たす状態は，$\phi = 0$ 以外にないことを示せ．

解答 生成消滅演算子の交換関係より，

$$\begin{aligned}\|\hat{a}^\dagger\phi\|^2 &= \langle\phi|\hat{a}\hat{a}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|1+\hat{a}^\dagger\hat{a}|\phi\rangle = \|\phi\|^2 + \|\hat{a}\phi\|^2 \\ &\geq \|\phi\|^2 \geq 0\,.\end{aligned}$$

従って，$\phi \neq 0$ であれば，$\hat{a}^\dagger|\phi\rangle = 0$ が満たされない．□

練習問題 3.2.2

状態 $|n\rangle$ の q-表示の関数形を求めよ．

解答 (3.8) より，

$$\begin{aligned}\langle q|\hat{a} &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{d}{dq}\right)\langle q|\,, \\ \langle q|\hat{a}^\dagger &= \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{d}{dq}\right)\langle q|.\end{aligned}$$

従って，基底状態の方程式 $\langle q|\hat{a}|0\rangle = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q + \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{d}{dq}\right)\langle q|0\rangle = 0$ は，規格化 $\langle 0|0\rangle = 1$ を考慮して

$$\langle q|0\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)q^2} = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\,, \quad \left(\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}q\right)$$

と解ける．一方，$\langle q|n\rangle$ は定義により，

$$\langle q|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q - \frac{\hbar}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\frac{d}{dq}\right)^n \langle q|0\rangle$$

*2) **シューアの補題**によれば，$a \to A(a)$ が群 G の規約表現であるとき，全ての $A(a)$ と可換な行列は単位行列に比例する．

$$= \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{1}{\sqrt{n!}2^{\frac{n}{2}}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$$
$$= \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{(-1)^n}{\sqrt{n!}2^{\frac{n}{2}}} e^{\frac{1}{2}\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2}.$$

ただし，$\frac{d}{d\xi}e^{\frac{1}{2}\xi^2} = e^{\frac{1}{2}\xi^2}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)$ を用いた．かくして，

$$\langle q|n\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \frac{e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}{\sqrt{n!}2^{\frac{n}{2}}} H_n(\xi)\ , \quad \left(H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \left(\frac{d}{d\xi}\right)^n e^{-\xi^2} \right)$$

となり，$\langle q|n\rangle$ は定数因子を除いて $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$ とエルミート多項式の積 $e^{-\frac{1}{2}\xi^2}H_n(\xi)$ に帰着し，前章の結果と一致する．□

3.2.2 コヒーレント状態と重複完全性

振動子変数は，コヒーレント状態と呼ばれ

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle\ , \ (\ \langle z|\hat{a}^\dagger = z^*\langle z|\ ) \tag{3.25}$$

で定義される，複素連続スペクトルに属する固有状態を持つ．(3.25) は線形方程式であるため，$|z\rangle$ は定数を除いて決定され，

$$|z\rangle = e^{z\hat{a}^\dagger}|0\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle \tag{3.26}$$

が解の形である．ここで，z は複素数であり，$\hat{a}$ がエルミート演算子ではないことから，

$$\langle z|z'\rangle = e^{z^*z'} \tag{3.27}$$

となり，$z \neq z'$ であっても可干渉（コヒーレント）で，直交はしない．この場合，$|z\rangle$ のノルムを 1 に規格化した状態は，明らかに

$$|z) = e^{-\frac{1}{2}|z|^2}|z\rangle \tag{3.28}$$

であり，以下の内積を持つ．

$$(z|z') = e^{-\frac{1}{2}\left(|z|^2+|z'|^2\right)+z^*z'}\ , \ (\ (z|z) = 1\ ). \tag{3.29}$$

さて，規格化されたコヒーレント状態は次の特徴を持つ．まず，$|z)$ の下で励起状態 $|n\rangle$ を見出す確率は，ポアソン分布

$$|\langle n|z)|^2 = e^{-\bar{n}}\frac{\bar{n}^n}{n!}\ , \quad \left(\bar{n} = \langle N\rangle = (z|\hat{N}|z) = |z|^2\right) \tag{3.30}$$

になる．ここで，$\bar{n} = |z|^2$ は平均励起数であり，また $(z|\hat{N}^2|z) = |z|^2(z|\hat{a}\hat{a}^\dagger|z) = |z|^2(|z|^2+1)$ から標準偏差も $\Delta N = \sqrt{\langle\hat{N}^2\rangle - \langle\hat{N}\rangle^2} = |z|^2$ となり，大きなエネルギー期待値を与える $|z)$ に対しては，エネルギーの標準偏差も大きくなり，逆も言える．

次に，$\{|z)\}$ は不確定性関係の最小値 $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$ を与え，**古典系に近い**記述を与える状態であることを注意する．実際，期待値 $\bar{q} = (z|\hat{q}|z)$, $\bar{p} = (z|\hat{p}|z)$ を使って $z = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\bar{q} + \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\bar{p}$ と書くと，ハミルトニアンの期待値が

$$\langle H \rangle_z = (z|\hat{H}|z) = \hbar\omega\left(z^* z + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2m}\bar{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\bar{q}^2 + \frac{\hbar\omega}{2} \tag{3.31}$$

となり，$(\bar{q}, \bar{p})$ は $\langle H \rangle_z$ をハミルトニアンと見なすと元の古典系と同等な力学変数となっている*3)．また，コヒーレント状態を時間発展させた $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|z) = |z(t))$, $(z(t) = e^{-i\omega t})$ もコヒーレント状態を保ち，不確定性関係の最小値を与える．この時，$\bar{q}(t) = (z(t)|\hat{q}|z(t)) = \bar{q}\cos(\omega t) + \frac{1}{2m}\bar{p}\sin(\omega t)$ は $(z|\hat{q}(t)|z)$ であると同時に，$\langle H \rangle_z$ を用いた $(\bar{q}, \bar{p})$ の古典運動方程式の解ともなっている．

さて，規格化されたコヒーレント状態 $\{|z)\}$ は，$z = re^{i\phi} = x + iy$ として，以下の意味で（重複）完全系をなす．

$$1 = \int \frac{d^2 z}{\pi}|z)(z|\,,\left(\, d^2 z = dxdy = rdrd\varphi\,\right). \tag{3.32}$$

これは，例えば (3.25) を考慮して

$$\begin{aligned}\langle n|\left\{\int \frac{d^2 z}{\pi}|z)(z|\right\}|m\rangle &= \frac{1}{\pi}\int_0^\infty rdr\int_0^{2\pi} d\varphi\frac{(re^{-i\phi})^n}{\sqrt{n!}}\frac{(re^{i\phi})^m}{\sqrt{m!}} \\ &= \delta_{nm}\frac{1}{n!}\int_0^\infty d(r^2)e^{-(r^2)}(r^2)^n = \delta_{nm}\frac{\Gamma(n+1)}{n!} = \delta_{nm}\end{aligned}$$

のように確かめられる．このような $\{|z)\}$ の完全性は，以下の性質を持つ z-表示による状態空間を構成できる．

$$\psi(z) = (z|\phi\rangle = e^{-\frac{1}{2}|z|^2}\langle z|\psi\rangle\,,\;(\,\psi^*(z) = \langle\psi|z)\,)\,, \tag{3.33}$$

$$(z|\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = z^*\psi(z)\,, \tag{3.34}$$

$$(z|\hat{a}|\psi\rangle = e^{-\frac{1}{2}z^* z}\langle 0|\frac{\partial}{\partial z^*}e^{z^*\hat{a}}|\psi\rangle = \left(\frac{\partial}{\partial z^*} + \frac{1}{2}z\right)\phi(z)\,, \tag{3.35}$$

および

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int \frac{d^2 z}{\pi}\psi(z)^*\phi(z). \tag{3.36}$$

3.2.3 遷移の確率振幅

調和振動子の演算子形式を基に，状態の遷移の確率振幅を求めておこう．ま

*3) $(\bar{q}, \bar{p})$ を古典正準変数と見なす時のポアソン括弧を (z, z^*) で表すと，

$$\{f, g\}_{\mathrm{PB}} = \frac{\partial f}{\partial \bar{q}}\frac{\partial g}{\partial \bar{p}} - \frac{\partial f}{\partial \bar{p}}\frac{\partial g}{\partial \bar{q}} = \frac{1}{i\hbar}\left(\frac{\partial f}{\partial z}\frac{\partial g}{\partial z^*} - \frac{\partial f}{\partial z^*}\frac{\partial g}{\partial z}\right)$$

となり，$\{z, z^*\}_{\mathrm{PB}} = -\{z^*, z\}_{\mathrm{PB}} = \frac{1}{i\hbar}$ を得る．従って，ディラックの正準量子化を適用すると，$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = i\hbar\{z, z^*\}_{\mathrm{PB}} = 1$ と正しい量子力学系が導かれる．

ず，状態空間 $\{|n\rangle\}$ および $\{|z)\}$ での，時刻 $t=0$ から $t(>0)$ への遷移の確率振幅の表式は簡単に求まり，$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}f(\hat{a}^\dagger)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=f(\hat{a}^\dagger e^{-i\omega t})$ に注意すれば

$$\langle n|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|m\rangle = e^{-i\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)t}\delta_{nm}, \tag{3.37}$$

$$(z|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|z') = e^{-i\frac{\omega}{2}t}e^{-\frac{1}{2}(|z|^2+|z'|^2)+z^*z'e^{-i\omega t}} \tag{3.38}$$

である．

次に，q-表示の状態空間 $\{|q\rangle\}$ における遷移の確率振幅を求める．このために，位置の演算子 $\hat{q}$ の固有状態 $|q\rangle$ を，固有値方程式と規格化条件

$$\hat{q}|q\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}^\dagger+\hat{a}\right)|q\rangle = q|q\rangle,$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q-q')$$

を解いて，

$$|q\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)q^2}e^{-\frac{1}{2}\hat{a}^{\dagger 2}+\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}q\hat{a}^\dagger}|0\rangle \tag{3.39}$$

の形に表す．これから，時刻 $t=0$ に位置 q' にある粒子が，時刻 $t(>0)$ に位置 q に遷移する確率振幅は，$|q,t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|q\rangle$ として[*4)]，

$$\begin{aligned}\langle q,t|q'\rangle &= \langle q|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|q'\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)(q^2+q'^2)}e^{-i\frac{\omega t}{2}}\\ &\quad\times\langle 0|e^{-\frac{1}{2}\hat{a}^2+\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}q\hat{a}}e^{-\frac{1}{2}(\hat{a}^\dagger e^{-i\omega t})^2+\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}q(\hat{a}^\dagger e^{-i\omega t})}|0\rangle\\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega t)}}\exp\left[\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega t)}\left\{(q^2+q'^2)\cos(\omega t)-2qq'\right\}\right]\end{aligned} \tag{3.40}$$

と求められる．この形については，後に経路積分の立場から再考する．

3.3 超対称量子力学

前節において基本となった，交換関係 (3.10) を満たす調和振動子の振動子変数は，歴史的には 1927 年にディラックにより導入された光子の粒子数を変える演算子であり，生成消滅演算子と言う用語の由来もここにある．この場合の N は，振動子に付随した量子数を持つ粒子の個数であり，その個数には (3.19) の意味で制限が付かないボーズ統計に従う．一方，1925 年にパウリにより指摘されていたように，スピン $\frac{1}{2}\hbar$ の電子は，一つの量子状態を二つ以上の電子が占めることができないフェルミ統計に従う．この性質を，振動子の代数から表現する手法は，1927 年にウィグナー–ヨルダンにより定式化され，フェルミ

*4) $|q,t\rangle$ はシュレディンガー表示の波動関数ではなく，練習問題 3.1.1 と同様にハイゼンベルク表示の位置の演算子 $\hat{q}(t)$ の固有値 q に属する固有状態である．

統計を導く反交換関係

$$\boxed{\{\hat{b},\hat{b}^\dagger\}=\hat{b}\hat{b}^\dagger+\hat{b}^\dagger\hat{b}=1,\ \{\hat{b},\hat{b}\}=\{\hat{b}^\dagger,\hat{b}^\dagger\}=0} \tag{3.41}$$

が提唱された．超対称量子力学系は，このようなフェルミ振動子 $(\hat{b},\hat{b}^\dagger)$ とボーズ振動子 $(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ から構成される力学系であり，場の量子論における超対称性に類似する構造を持っているが，それ自体として，量子力学のポテンシャル問題を再考する内容を含んでいる．

3.3.1 フェルミ振動子の行列表現とグラスマン変数

反交換関係 (3.41) で定義されたフェルミ振動子から，ボーズ振動子に倣って励起数演算子を $\hat{N}_b=\hat{b}^\dagger\hat{b}$ と定義すると，

$$[\hat{N}_b,\hat{b}]=\hat{b}^\dagger\{\hat{b},\hat{b}\}-\{\hat{b}^\dagger,\hat{b}\}\hat{b}=-\hat{b}, \tag{3.42}$$

$$[\hat{N}_b,\hat{b}^\dagger]=\hat{b}^\dagger\{\hat{b},\hat{b}^\dagger\}-\{\hat{b}^\dagger,\hat{b}^\dagger\}\hat{b}=\hat{b}^\dagger \tag{3.43}$$

が得られる．従って，固有状態 $\hat{N}_b|n_b\rangle=n_b|n_n\rangle$ に対し，(3.16), (3.17) と同様の計算から $\hat{b}|n_b\rangle\propto|n_b-1\rangle$ および $\hat{b}^\dagger|n_b\rangle\propto|n_b+1\rangle$ となり，$\hat{b}^\dagger$ および $\hat{b}$ がそれぞれ**生成**および**消滅**演算子の意味を持つことになる．ただし，$\hat{b}^{\dagger 2}=0$ であるため励起数は 1 に止まり，完全系は

$$|0\rangle,\quad |1\rangle=\hat{b}^\dagger|0\rangle,\qquad (\,\hat{b}|0\rangle=0,\ \langle 0|0\rangle=1\,) \tag{3.44}$$

の 2 次元基底となる．これらの基底は，明らかに正規直交系 $\langle n|m\rangle=\delta_{nm}$, $(n,m=0,1)$ をなし，生成消滅演算子の行列要素 $\langle 1|\hat{b}^\dagger|0\rangle=\langle 0|\hat{b}|1\rangle=1$（他は 0）を与える．これより，上記のフェルミ振動子とその基底に対し，2 次元表現

$$|0\rangle=\begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix},\qquad |1\rangle=\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \tag{3.45}$$

$$\hat{b}=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}=\sigma_-,\qquad \hat{b}^\dagger=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix}=\sigma_+ \tag{3.46}$$

を構成することができる．ここで $\sigma_\pm$ は，スピンの 2 次元表現に関連して導入されたパウリ行列（付録 D.3 節）から $\sigma_\pm=\frac{1}{2}(\sigma_1\pm i\sigma_2)$ に従って定義される行列で，$\{\sigma_3,\sigma_\pm\}=0,[\sigma_+,\sigma_-]=\sigma_3$ を満たす．

この行列表現と関連して，N 振動子系の構成を指摘しておこう．ボーズ振動子の場合は簡単で，独立な正準変数 $(\hat{q}_i,\hat{p}_i),(i=1,2,\cdots,N)$ から (3.8), (3.9)（m,ω は i に依存してよい）に従って $(\hat{a}_i,\hat{a}_i^\dagger)$ を定義すれば，自然に $[\hat{a}_i,\hat{a}_j^\dagger]=\delta_{ij}$ を満たす振動子になる．一方，

$$\{\hat{b}_i,\hat{b}_j^\dagger\}=\delta_{ij},\quad \{\hat{b}_i,\hat{b}_j\}=\{\hat{b}_i^\dagger,\hat{b}_j^\dagger\}=0 \tag{3.47}$$

を満たすフェルミ振動子は，(3.46) の行列の直積

$$\hat{b}_i = \underbrace{\sigma_3 \otimes \cdots \otimes \sigma_3}_{i-1} \otimes \sigma_- \otimes \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{N-i}\,, \tag{3.48}$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \underbrace{\sigma_3 \otimes \cdots \otimes \sigma_3}_{i-1} \otimes \sigma_+ \otimes \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{N-i} \tag{3.49}$$

により，構成できる．

このように，フェルミ振動子は有限次元空間の演算子であるが，これに対しても量子化の後フェルミ振動子を生成する古典的自由度を考えることはできる．古典系の力学変数は量子力学系の固有値として現れることから，試みにフェルミ振動子のコヒーレント状態を表す固有値方程式

$$\hat{b}_i|\boldsymbol{\theta}\rangle = \theta_i|\boldsymbol{\theta}\rangle, \ \ (i = 1, 2, \cdots, N;\, |\boldsymbol{\theta}\rangle = |\theta_1\rangle \otimes |\theta_2\rangle \otimes \cdots \otimes |\theta_N\rangle\,) \tag{3.50}$$

を考える．(3.47) により，この方程式が矛盾のない意味を持つためには，

$$\theta_i\theta_j = -\theta_j\theta_i,\ \theta_i^2 = 0,\ (i, j = 1, 2, \cdots, N) \tag{3.51}$$

でなくてはならない．このような変数 $\{\theta_i\}$ はグラスマン変数と呼ばれ，フェルミ振動子は何らかの意味でグラスマン変数から組み立てられる古典力学系を量子化したものだと言える．

次に，グラスマン変数を用いて，フェルミ振動子のコヒーレント状態を具体的に構成する．議論の本質は 1 自由度の場合で尽きているため，以下 $N = 1$ とする．このとき，$\theta, \bar{\theta}$, $(\theta\bar{\theta} = -\bar{\theta}\theta,\, \theta^2 = \bar{\theta}^2 = 0)$ を独立なグラスマン変数として，固有値方程式

$$\hat{b}|\theta\rangle = \theta|\theta\rangle,\ \langle\theta|\hat{b}^\dagger = \langle\theta|\bar{\theta} \tag{3.52}$$

を置く．この形から，$\bar{\theta}$ はグラスマン変数 θ の複素共役の意味を持たせたことになる．この方程式は，$(\theta, \bar{\theta})$ と $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ を**反可換**とする設定の下で，規格化定数を除いて容易に解けて

$$|\theta\rangle = e^{-\theta\hat{b}^\dagger}|0\rangle = |0\rangle - \theta|1\rangle\,, \tag{3.53}$$

$$\langle\theta| = \langle 0|e^{\hat{b}\bar{\theta}} = \langle 0| - \langle 1|\bar{\theta} \tag{3.54}$$

を得る．このとき，$\theta\bar{\theta}$, $\bar{\theta}\theta$ は，$(\theta, \bar{\theta})$ および $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ の何れとも可換なボーズ的変数であることに注意すると，コヒーレント状態 $|\theta\rangle$ のノルムは $\langle\theta|\theta\rangle = 1 + \bar{\theta}\theta = e^{\bar{\theta}\theta}$ となり，ノルムを 1 に規格化したコヒーレント状態は，

$$|\theta) = e^{-\frac{1}{2}\bar{\theta}\theta}|\theta\rangle,\ \ (\theta| = \langle\theta|e^{-\frac{1}{2}\bar{\theta}\theta} \tag{3.55}$$

となる．そこで，フェルミ振動子のハミルトニアンをボーズ振動子のハミルトニアン (3.11) に倣って，

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2}(\hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}\hat{b}^\dagger) = \hbar\omega\left(\hat{b}^\dagger\hat{b} - \frac{1}{2}\right) \tag{3.56}$$

と置くと，ボーズ振動子の (3.31) に対応する期待値は

$$\langle\hat{H}\rangle_\theta = \hbar\omega\left(\bar{\theta}\theta - \frac{1}{2}\right) \tag{3.57}$$

となる．(3.57) が古典 $(\theta,\bar{\theta})$ 系のハミルトニアンとしての意味を持つことを明らかにするために，グラスマン変数のポアソン括弧を定義しよう．このために，グラスマン変数の微分を定義しなくてはならないが，グラスマン変数の 2 次項は存在しないので，微分は単にその変数を取り除くことに相当する．即ち

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\theta = \frac{\partial}{\partial\bar{\theta}}\bar{\theta} = 1\,, \tag{3.58}$$

$$\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\theta\bar{\theta}\right) = \bar{\theta},\ \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\bar{\theta}\theta\right) = -\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\theta\bar{\theta}\right) = -\bar{\theta}\ \text{ etc.} \tag{3.59}$$

である．ここで第 2 式は，微分される変数を微分演算子の右隣に配置してから取り除く規則に従ったことの帰結である*5)．

次章で議論される結果を先走って言えば，(z,z^*) が $(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ に対応する古典量で，そのハミルトニアンが (3.31) であったのと同様に，(3.57) は $(\theta,\bar{\theta})$ を力学変数とするフェルミ振動子の古典的ハミルトニアンであり，その系のラグランジアンは

$$L = i\hbar\bar{\theta}\dot{\theta} - \hbar\omega\left(\bar{\theta}\theta - \frac{1}{2}\right) \tag{3.60}$$

と書ける．これから，θ に正準共役な運動量は左微分の意味で $\pi = \frac{\partial}{\partial\dot{\theta}}L = -i\hbar\bar{\theta}$ となり，正準量子化 $\{\theta,\pi\} = i\hbar\{\theta,\bar{\theta}\} = i\hbar$ より，$(\hat{b},\hat{b}^\dagger)$ を $(\theta,\bar{\theta})$ の量子力学的対応物と考えることが正当化される．

次に，コヒーレント状態 $\{|\theta\rangle\}$ が，(3.32) に対応する完全性を持つことを示そう．このために，グラスマン変数の積分を定義しなくてはならないが，実は微分と同一演算子となる．これを知るために，グラスマン変数の任意関数を $\theta^2 = 0$ を考慮して $f(\theta) = f(0) + \theta f'(0)$ と展開する．同じ意味で，ディラックのデルタ関数に対応する $\delta(\theta)$ も $\delta(\theta) = \delta(0) + \theta\delta'(0)$ と展開できるから，積分の満たすべき性質は

$$\int d\theta\delta(\theta)f(\theta) = \int d\theta\left\{\delta(0)\theta f'(0) + \theta\delta'(0)f(0)\right\} = f(0)$$

である．これが，任意の $f(\theta)$ について成立することから，$\delta(0) = 0$, $\delta'(0) = 1$,

---

*5) 一般に，$\theta_1, \theta_2, \cdots$，が独立なグラスマン変数である場合，

$$\frac{\partial}{\partial\theta_k}\underbrace{\theta_i\cdots\theta_j}_{n}\theta_k\theta_l\cdots\theta_m = (-1)^n\theta_i\cdots\theta_j\theta_l\cdots\theta_m$$

である．この定義は，微分される変数を左に移動させて取り除くので左微分（あるいは逆に，変数を演算子の右隣に配置して取り除くので右微分）と呼ばれる．

および $\int d\theta\theta = 1$ が要求され，結局グラスマン変数の積分はデルタ関数の定義と一体になって定まり，

$$\boxed{\begin{aligned} &\int d\theta(\cdots) = \frac{\partial}{\partial\theta}(\cdots), \\ &\delta(\theta) = \theta\ , \quad \left(\int d\theta\delta(\theta) = 1 \right) \end{aligned}} \tag{3.61}$$

となる．この定義の下で，

$$\begin{aligned} \int d\bar{\theta}d\theta|\theta)(\theta| &= \frac{\partial}{\partial\bar{\theta}}\frac{\partial}{\partial\theta}e^{-\bar{\theta}\theta}\big(|0\rangle - \theta|1\rangle\big)\big(\langle 0| - \langle 1|\bar{\theta}\big) \\ &= \frac{\partial}{\partial\bar{\theta}}\frac{\partial}{\partial\theta}\big(- \bar{\theta}\theta|0\rangle\langle 0| + \theta|1\rangle\langle 1|\bar{\theta}\ \big) \\ &= |0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1| = 1 \end{aligned} \tag{3.62}$$

が確かめられ，フェルミ振動子のコヒーレント状態は有限次元の状態ベクトルではあるが，連続変数の積分に類似した形で完全性が表現できる．

3.3.2 超対称構造を持つ力学系の固有値問題

ボーズ振動子のハミルトニアン (3.11) を改めて $\hat{H}_{\mathrm{B}}$ と書き，フェルミ振動子のハミルトニアン (3.56) を $\hat{H}_{\mathrm{F}}$ として同じ重みで加えた合成系のハミルトニアン

$$\hat{H}_{\mathrm{S}} = \hat{H}_{\mathrm{B}} + \hat{H}_{\mathrm{F}} = \hbar\omega(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b}) \tag{3.63}$$

は，置換 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger) \leftrightarrow (\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$ の下で対称であり，またその対称性に結び付いて，0 点振動のエネルギー $\frac{\hbar\omega}{2}$ が相殺されて消える特徴を持っている．この置換の生成子は $\hat{Q} = \hat{a}\hat{b}^\dagger$ および $\hat{Q}^\dagger = \hat{b}\hat{a}^\dagger$ であり，$\epsilon, \bar{\epsilon}$ をグラスマン変数の（無限小）パラメーターとして $\hat{G} = \epsilon\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger\bar{\epsilon}$ と置くと，

$$\delta\hat{a} = i[\hat{G}, \hat{a}] = -i\hat{b}\bar{\epsilon}, \quad (\,\delta\hat{a}^\dagger = i\epsilon\hat{b}^\dagger\,), \tag{3.64}$$

$$\delta\hat{b} = i[\hat{G}, \hat{b}] = i\epsilon\hat{a}, \qquad (\,\delta\hat{b}^\dagger = -i\bar{\epsilon}\hat{a}^\dagger\,) \tag{3.65}$$

等の変換が引き起こされる．この形から $[\hat{G}, \hat{H}_{\mathrm{S}}] = 0$ であり，$\hat{G}$ はボーズ的自由度とフェルミ的自由度を入れ替える**超対称変換**の生成子で，$\hat{H}_{\mathrm{S}}$ を不変にする保存量となっている．この意味で，$\hat{H}_{\mathrm{S}}$ は超対称量子力学系の一例であり，その固有値と固有状態は明らかに

$$\hat{H}_{\mathrm{S}}|n, i\rangle = \underbrace{\hbar\omega(n+i)}_{E_{n,i}}|n, i\rangle\ , \ (\,n = 0, 1, 2, \cdots\ ; \ i = 0, 1\,), \tag{3.66}$$

$$|n, i\rangle = \frac{\hat{a}^{\dagger n}}{\sqrt{n!}}|0\rangle_{\mathrm{B}} \otimes \hat{b}^{\dagger i}|0\rangle_{\mathrm{F}} \tag{3.67}$$

である．ここで，$|0\rangle_{\mathrm{B}}$, $|0\rangle_{\mathrm{F}}$ は，$\hat{a}$ と $\hat{b}$ の基底状態を明示的に添字 B, F を付け

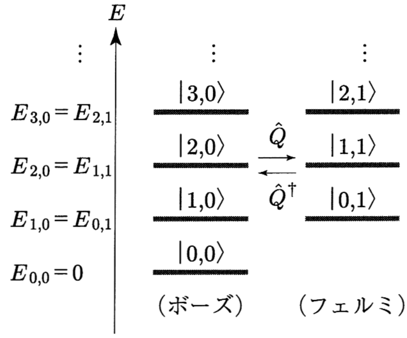


図 3.1 超対称振動子系のエネルギー準位の構造：基底状態を除いて，ボーズ的状態とフェルミ的状態のエネルギー準位が縮退している．

て区別したものである．そこで，$i=0$ をフェルミ振動子の基底状態（ボーズ的状態），また $i=1$ をフェルミ振動子の励起状態（フェルミ的状態）と考えれば，

$$\hat{Q}|n,0\rangle = \sqrt{n}|n-1,1\rangle\,,\quad \hat{Q}^\dagger|n,1\rangle = \sqrt{n+1}|n+1,0\rangle \tag{3.68}$$

から，$\hat{Q}$ はボーズ的状態をフェルミ的状態に，また $\hat{Q}^\dagger$ はフェルミ的状態からボーズ的状態に移す演算子として働くことが分かる．とくにエネルギーの固有値は，$E_{n,0}=E_{n-1,1}$, $(n \geq 1)$ の意味で基底状態を除いて 2 重に縮退している．基底状態 $|0,0\rangle$ は，$\hat{Q}|0,0\rangle = 0$ のため超対称変換で移る状態が無く，孤立した 1 重項を形成する（図 3.1）．

以上のような，超対称振動子系に現れるハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値構造は，より一般的な超対称力学系においても存在する．これを調べるために，超対称振動子系の $(\sqrt{\hbar\omega}\hat{a}, \sqrt{\hbar\omega}\hat{a}^\dagger)$ を一般化した演算子 $(\hat{A}, \hat{A}^\dagger)$ を，以下に従って導入する．

$$\hat{A} = \frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W(\hat{q})\,,\quad \hat{A}^\dagger = -\frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W(\hat{q}). \tag{3.69}$$

超対称振動子系は $W(\hat{q}) = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2}}\hat{q}$ の場合であるが，以下では関数形を特定せず $W(\hat{q})$ を**超ポテンシャル**と呼ぶ．一般化された系において，$(\hat{A}, \hat{A}^\dagger)$ とフェルミ振動子 $(\hat{b}, \hat{b}^\dagger)$，あるいはその行列表示を用いると，超対称変換の生成子を

$$\hat{\mathcal{Q}} = \hat{A}\hat{b}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \hat{A} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\,,\quad \hat{\mathcal{Q}}^\dagger = \hat{b}\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{A}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \tag{3.70}$$

と定義できる．そこで，超対称振動子系の $\hat{H} = \hbar\omega\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$（練習問題 3.3.1）に対応させて，超ポテンシャルを持つ力学系のハミルトニアンを

$$\hat{H} = \{\hat{\mathcal{Q}}, \hat{\mathcal{Q}}^\dagger\} = \begin{pmatrix} \hat{A}\hat{A}^\dagger & 0 \\ 0 & \hat{A}^\dagger\hat{A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{H}_+ & 0 \\ 0 & \hat{H}_- \end{pmatrix} \tag{3.71}$$

と置く*6)．このとき，$\hat{Q}^2 = \hat{Q}^{\dagger 2} = 0$ から練習問題 3.3.1 と同様に $[\hat{Q}, \hat{H}] = [\hat{Q}^\dagger, \hat{H}] = 0$ が導かれ，$(\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger, \hat{H})$ は超代数を満たす演算子の組をなし，考えている系は超対称量子力学系となっている．

次に，超対称量子力学系のハミルトニアン (3.71) の固有状態が，超対称振動子系 (3.63) と類似した構造を持つことを確かめる．まず，$\hat{H} = (\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger)^2$ と書けることから，$\langle \hat{H} \rangle \geq 0$ であり，基底状態は $\hat{Q}|0\rangle = \hat{Q}^\dagger|0\rangle = 0$ を満たす．この二つの条件は，$\hat{A}\Phi_0 = 0$ を満たす状態 Φ_0 を用いて $|\Phi_0, 0\rangle = |\Phi_0\rangle_B \otimes |0\rangle_F = \begin{pmatrix} 0 \\ \Phi_0 \end{pmatrix}$ とおけば満たされる．Φ_0 の満たす方程式は，q-表示で

$$\langle q|\hat{A}|\Phi_0\rangle = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{d}{dq} + W(q)\right)\Phi_0(q) = 0 \tag{3.72}$$

であり，超ポテンシャルと基底状態の状態関数との関係

$$\boxed{W(q) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{\Phi_0'(q)}{\Phi_0(q)}} \tag{3.73}$$

を導く．次に，励起状態の構造を調べるために，$n = 1, 2, \cdots$ として

$$\hat{H}_\pm|\Phi_n^{(\pm)}\rangle = E_n^{(\pm)}|\Phi_n^{(\pm)}\rangle\ , \quad (\langle\Phi_n^{(\pm)}|\Phi_m^{(\pm)}\rangle = \delta_{nm}) \tag{3.74}$$

を満たす固有状態を考える．基底状態は $\hat{H}_-|\Phi_0\rangle = 0$ を満たし，この意味で $\Phi_0 \equiv \Phi_0^{(-)}, (E_0^{(-)} = 0)$ と書いて $H_\pm$ での固有状態の空間を $\mathcal{H}_- = \{\Phi_n^{(-)}; n = 0, 1, 2, \cdots\}$, $\mathcal{H}_+ = \{\Phi_n^{(+)}; n = 1, 2, \cdots\}$ と記す．このとき，$\hat{H}_\pm$ の定義から，

$$\hat{A}\hat{H}_- = \hat{A}(\hat{A}^\dagger\hat{A}) = \hat{H}_+\hat{A}, \tag{3.75}$$

$$\hat{A}^\dagger\hat{H}_+ = \hat{A}^\dagger(\hat{A}\hat{A}^\dagger) = \hat{H}_-\hat{A}^\dagger \tag{3.76}$$

に注意すると，$\hat{H}_+\hat{A}|\Phi_n^{(-)}\rangle = E_n^{(-)}\hat{A}|\Phi_n^{(-)}\rangle$ より $\hat{A}|\Phi_n^{(-)}\rangle \in \mathcal{H}_+$ であり，これを $N|\Phi_n^{(+)}\rangle$ に置くと $E_n^{(-)} = E_n^{(+)}$ となる．ここで比例定数 N は，$\langle\Phi_n^{(-)}|\hat{A}^\dagger\hat{A}|\Phi_n^{(-)}\rangle = E_n^{(-)} = N^2$ を満たし，$\hat{A}|\Phi_n^{(-)}\rangle = \sqrt{E_n^{(-)}}|\Phi_n^{(+)}\rangle$ と決まる．同様に，$\hat{A}^\dagger|\Phi_n^{(+)}\rangle = \sqrt{E_n^{(+)}}|\Phi_n^{(-)}\rangle$ も得られる．従って，状態

$$|\Phi_n^{(-)}, 0\rangle = |\Phi_n^{(-)}\rangle_B \otimes |0\rangle_F = \begin{pmatrix} 0 \\ |\Phi_n^{(-)}\rangle \end{pmatrix}, (n = 0, 1, 2, \cdots), \tag{3.77}$$

$$|\Phi_n^{(+)}, 1\rangle = |\Phi_n^{(+)}\rangle_B \otimes |1\rangle_F = \begin{pmatrix} |\Phi_n^{(+)}\rangle \\ 0 \end{pmatrix}, (n = 1, 2, \cdots) \tag{3.78}$$

に対し，

---

*6) $\hat{H} = \left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + W(\hat{q})\right) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{q})\sigma_3$ であり，(g 因子×)3 軸方向の外部磁場 $gB(q) = \frac{2}{\sqrt{2m}}W'(q)$ とスピン $\hbar\sigma_3/2$ の相互作用が導入された系のハミルトニアンとなっている．

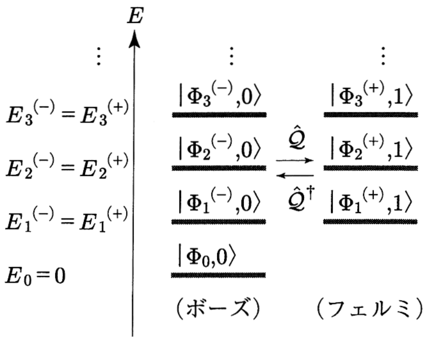


図 3.2　一般的な超対称量子力学系のエネルギー準位：超対称振動子系と同様に，基底状態を除いてボーズ的状態とフェルミ的状態のエネルギー準位が縮退する．

$$\hat{H}|\Phi_n^{(-)},0\rangle = E_n^{(-)}|\Phi_n^{(-)},0\rangle\,, \tag{3.79}$$
$$\hat{H}|\Phi_n^{(+)},1\rangle = E_n^{(+)}|\Phi_n^{(+)},1\rangle \tag{3.80}$$

および

$$\hat{\mathcal{Q}}|\Phi_n^{(-)},0\rangle = \sqrt{E_n^{(-)}}|\Phi_n^{(+)},1\rangle, \tag{3.81}$$
$$\hat{\mathcal{Q}}^\dagger|\Phi_n^{(+)},1\rangle = \sqrt{E_n^{(+)}}|\Phi_n^{(-)},0\rangle \tag{3.82}$$

が成立する．この結果，系のエネルギー準位は図 3.1 の超対称振動子系と類似の構造（図 3.2）を持つことになる．とくに基底状態 $\Phi_0^{(-)}$ は超対称な一重項，即ち超対称状態を形成するが，ウィッテンにより指摘されたように[15]，$W(q)$ の性質により規格化可能な Φ_0 が存在しない場合（超対称性が破れる場合）もある（練習問題 3.3.4）．

さらに，注目すべきは，異なるハミルトニアン

$$\hat{H}_+ = \hat{A}\hat{A}^\dagger = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V_+(\hat{q})\,, \tag{3.83}$$
$$\hat{H}_- = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V_-(\hat{q}) \tag{3.84}$$

ただし，

$$V_\pm(\hat{q}) = W(\hat{q})^2 \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W'(\hat{q}) \tag{3.85}$$

が，$\Phi_n^{(-)} \neq \Phi_n^{(+)}$ であっても同じ固有値を導くことである．$V_\pm$ は超対称パートナーポテンシャルと呼ばれ，V_+ では複雑に見える固有値問題も V_- では簡単になる場合や，あるいはその逆の場合もある．ハミルトニアンを $H_\pm$ のように演算子的に因数分解をした形から固有値の構造を調べる方法は**因数分解法**と呼ばれ，超対称量子力学系はその例となっている．

この節の最後に，超対称量子力学の視点は，散乱問題においても有効である

ことを述べておこう．空間の方向を明確にするために q を x と書き，$W(x)$ が $x \to \pm\infty$ で漸近的に

$$W(x) \to \begin{cases} W_L & (x \to -\infty), \\ W_R & (x \to +\infty) \end{cases} \tag{3.86}$$

のように，定数値 $W_{L/R}$ に近づく場合を考える．このとき $\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ として

$$\hat{H}_\pm \to \begin{cases} \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + W_L^2 & (x \to -\infty), \\ \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + W_R^2 & (x \to +\infty) \end{cases} \tag{3.87}$$

となる．そこで，$x < 0$ の十分遠方から $x > 0$ 方向に，エネルギー E の粒子に対応する平面波 e^{ikx} が飛来し，一部は原点近傍の $V_\pm$ ポテンシャルで反射され，一部は $x > 0$ 方向に透過したとする．このとき，パートナーポテンシャル $V_\pm$ が規定する状態 $\Phi^{(\pm)}_{E,k}(x)$ は，漸近形

$$\Phi^{(\pm)}_{E,k}(x) \to \begin{cases} e^{ikx} + R_\pm e^{-ikx} & (x \to -\infty), \\ T_\pm e^{ik'x} & (x \to +\infty) \end{cases} \tag{3.88}$$

を持つことになり，固有値方程式 $\hat{H}_\pm \Phi^{(\pm)}_{E,k}(x) = E\Phi^{(\pm)}_{E,k}(x)$ から

$$k = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - W_L^2)}, \quad k' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - W_R^2)} \tag{3.89}$$

が導かれる．ここで，$L\,(x \to -\infty)$, $R\,(x \to \infty)$ 領域での消滅演算子が $\hat{A}_{L/R} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\frac{d}{dx} + W_{L/R}$ と書け，$\hat{A}\Phi^{(-)}_{E,k} = \sqrt{E}\Phi^{(+)}_{E,k}$ であったことに注意すると，

$$\begin{aligned} \hat{A}_L \Phi^{(-)}_{E,k}(x) &= \left(\frac{i\hbar k}{\sqrt{2m}} + W_L\right)e^{ikx} + \left(-\frac{i\hbar k}{\sqrt{2m}} + W_L\right)R_- e^{-ikx} \\ &= N\left(e^{ikx} + R_+ e^{-ikx}\right), \quad (x \to -\infty), \end{aligned} \tag{3.90}$$

$$\begin{aligned} \hat{A}_R \Phi^{(-)}_{E,k'}(x) &= \left(\frac{i\hbar k'}{\sqrt{2m}} + W_R\right)T_- e^{ik'x} \\ &= NT_+ e^{ik'x}, \quad (x \to \infty) \end{aligned} \tag{3.91}$$

(N=const.) を得る．従って，上の関係式の $e^{\pm ikx}, e^{ik'x}$ の係数を比較すると $N = \frac{i\hbar k}{\sqrt{2m}} + W_L$ と求まり，これから

$$R_- = \frac{\sqrt{2m}W_L + i\hbar k}{\sqrt{2m}W_L - i\hbar k}R_+, \quad T_- = \frac{\sqrt{2m}W_L + i\hbar k}{\sqrt{2m}W_R + i\hbar k'}T_+ \tag{3.92}$$

が得られる[*7]．(3.89) から．明らかに $|R_-|^2 = |R_+|^2$, $|T_-|^2 = |T_+|^2$ であり，パートナーポテンシャルはエネルギー固有値のみならず，散乱問題における反射係数，透過係数においても，同等の効果をもたらす．

*7） (3.89) に注意すると，$\frac{\sqrt{2m}W_L + i\hbar k}{\sqrt{2m}W_R + i\hbar k} = \frac{\sqrt{2m}W_R - i\hbar k'}{\sqrt{2m}W_L - i\hbar k}$ と書くこともできる．

練習問題 3.3.1

$\hat{H} = \hbar\omega\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$ を確かめ，この形から $[\hat{Q}, \hat{H}] = [\hat{Q}^\dagger, \hat{H}] = 0$ を導け．

解答 $\hat{Q}\hat{Q}^\dagger = (\hat{a}\hat{b}^\dagger)(\hat{b}\hat{a}^\dagger) = \hat{a}\hat{a}^\dagger\hat{b}^\dagger\hat{b} = (1 + \hat{a}^\dagger\hat{a})\hat{b}^\dagger\hat{b}$. 同様に，$\hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \hat{a}^\dagger\hat{a}(1 - \hat{b}^\dagger\hat{b})$ も導かれ，$\hat{Q}\hat{Q}^\dagger + \hat{Q}^\dagger\hat{Q} = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b}$ から $\hat{H} = \hbar\omega\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$ である．ここで，$\hat{Q}^2 = \hat{Q}^{\dagger 2} = 0$ に注意すると，

$$[\hat{Q}, \hat{H}] = \hbar\omega\left\{\hat{Q}\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} - \{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}\hat{Q}\right\} = \hbar\omega\left\{\hat{Q}\hat{Q}^\dagger\hat{Q} - \hat{Q}\hat{Q}^\dagger\hat{Q}\right\} = 0.$$

$[\hat{Q}^\dagger, \hat{H}] = 0$ も，上式のエルミート共役として成立する．□

練習問題 3.3.2

エルミート演算子 $\hat{Q}_1 = \sqrt{\hbar\omega}(\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger)$, $\hat{Q}_2 = i\sqrt{\hbar\omega}(\hat{Q} - \hat{Q}^\dagger)$ と，超対称力学系のハミルトニアン $\hat{H}$ の間に成立する代数構造を調べよ．

解答 定義より，$\hat{Q}_1^2 = \hbar\omega\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$ および $\hat{Q}_2^2 = \hbar\omega\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\}$ が成立する．また，

$$\{\hat{Q}_1, \hat{Q}_2\} = \hbar\omega\{\hat{Q} + \hat{Q}^\dagger, \hat{Q} - \hat{Q}^\dagger\} = \hbar\omega\left(\{\hat{Q}, \hat{Q}^\dagger\} - \{\hat{Q}^\dagger, \hat{Q}\}\right) = 0$$

であり，前問より $[\hat{Q}_i, \hat{H}] = 0, (i = 1, 2)$ も明らか．以上をまとめると，

$$\boxed{\begin{aligned}\{\hat{Q}_i, \hat{Q}_j\} &= 2\delta_{ij}\hat{H},\\ [\hat{Q}_i, \hat{H}] &= 0.\end{aligned}}$$

□

練習問題 3.3.3

一般的な超対称量子力学系におけるエネルギー準位 $E_n^{(\pm)}$ と固有状態 $|\Psi_0, 0\rangle$, $|\Psi_n^{(-)}, 0\rangle$ および $|\Phi_n^{(+)}, 1\rangle$, $(n = 1, 2, \cdots)$ を，超対称振動子系の場合に具体的に書き下せ．

解答 超対称振動子系の場合，$\hat{H}_- = \hat{A}^\dagger\hat{A} = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a} = \hbar\omega\hat{N}$ および $\hat{H}_+ = \hat{A}\hat{A}^\dagger = \hbar\omega\hat{a}\hat{a} = \hbar\omega(\hat{N} + 1)$ であるから，基底状態は，明らかに $|\Phi_0, 0\rangle = |0, 0\rangle$ でハミルトニアンの固有値は $E_0 = 0$. 励起状態は，$\hat{H}_-|n\rangle = \hbar\omega n|n\rangle$, $\hat{H}_+|n - 1\rangle = \hbar\omega n|n - 1\rangle$ から $E_n^{(\pm)} = \hbar\omega n, (n = 1, 2, \cdots)$ で，対応する固有状態は $|\Phi_n^{(-)}, 0\rangle = |n, 0\rangle$ および $|\Phi_n^{(+)}, 1\rangle = |n - 1, 1\rangle$ となる．□

練習問題 3.3.4

区間 $-\infty < q < \infty$ で定義された系において，超ポテンシャル $W(q)$ の偶奇性と，基底状態 $\Phi_0(q)$ の規格化可能性の関係を調べよ．

解答 $W(q)$ と $\Phi_0(q)$ の関係 (3.73) を解くと，

$$\Phi_0(q) = N\exp\left\{-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{q_0}^{q} dq' W(q')\right\}, (q_0, N = \text{const.}).$$

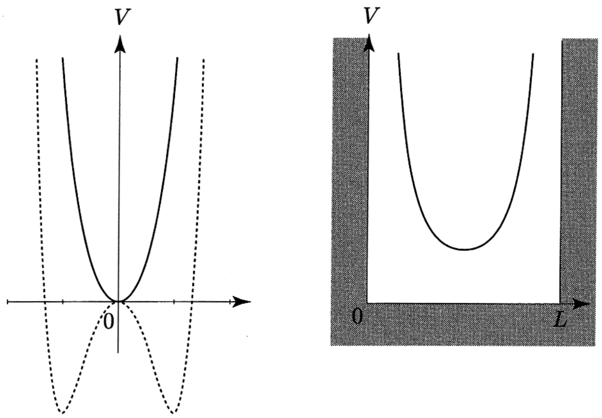


図 3.3　左図は，$W(q) = kq^3$ から生成されるポテンシャル V_+（実線）と，そのパートナーポテンシャル V_-（破線）．右図は，井戸型ポテンシャル V_- と，そのパートナーポテンシャル V_+．

従って，$W(q)$ が奇関数であり，積分結果が $|q| \to \infty$ で増大する偶関数になれば，$\Phi_0(q)$ は遠方で 0 となって規格化可能になる．一方，$W(q)$ が偶関数であれば積分結果は奇関数となり，q 軸上の一方で $+\infty$ に増大すれば他方で $-\infty$ になり，$\Phi_0(q)$ は何れかの遠方で発散して 1 に規格化できない．□

練習問題 3.3.5

超ポテンシャルが $W(q) = kq^3$, $(k = \text{const.} > 0)$ である場合の，$\hat{H}_\pm$ を定義するポテンシャル $V_\pm$ を求めて図示せよ．

解答　定義により

$$V_-(q) = W(q)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(q) = k^2q^6 - 3kq^2,$$
$$V_+(q) = W(q)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(q) = k^2q^6 + 3kq^2.$$

従って，V_+ は唯一の安定点 $q = 0$ を持つが，V_- は停留点を持つ二重井戸型構造となっている（図 3.3 左図）．□

練習問題 3.3.6

前章（2.6.2 節）で扱った井戸型ポテンシャル（図 2.5）のハミルトニアンに付加定数を加えて超対称量子力学系の $\hat{H}_-$ 部分を定義し，井戸型ポテンシャルの対となる $\hat{H}_+$ の超対称パートナーポテンシャルを求めよ．

解答　本文に合わせて座標変数を q と書き，井戸型ポテンシャル $V(q)$ の中にある質量 m の粒子のハミルトニアンを $\hat{H}_0$ とする．既に求めたように，ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有値は $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{(n+1)\pi}{L}\right\}^2, (n = 0, 1, 2, \cdots)$ で，固有値 E_n に属する固有状態は $\Psi_{E_n}(q) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{(n+1)\pi q}{L}\right)$ であった[*8]．そこで，

*8)　E_0 が基底状態のエネルギーとなるように，添字の番号をずらしている．

$\hat{H}_- \equiv \hat{H}_0 - E_0$ で定義されるハミルトニアンは，$\Phi_0^{(-)}(q) = \Psi_{E_0}(q)$ を基底状態として持ち，対応する固有値は $E_0^{(-)} = 0$ となる．従って，超対称量子力学系の超ポテンシャル $W(q)$ は，

$$W(q) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\Psi'_{E_0}(q)}{\Psi_{E_0}(q)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{\pi}{L} \cot\left(\frac{\pi q}{L}\right)$$

である．そこで，$\hat{H}_-$ を定義するポテンシャル $V_-(q)$, $(0 < q < L)$ は，

$$\begin{aligned} V_-(q) &= W(q)^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(q) \\ &= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \left[\frac{\cos^2(\pi q/L)}{\sin^2(\pi q/L)} - \frac{1}{\sin^2(\pi q/L)}\right] = -E_0 \end{aligned}$$

となり，対となる $\hat{H}_+$ のパートナーポテンシャルは，

$$\begin{aligned} V_+(q) &= W(q)^2 + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}} W'(q) \\ &= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \left[\frac{\cos^2(\pi q/L)}{\sin^2(\pi q/L)} + \frac{1}{\sin^2(\pi q/L)}\right] \\ &= \frac{\hbar}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \frac{2}{\sin^2(\pi q/L)} - E_0 \end{aligned}$$

と求まる．ポテンシャルの原点を元に戻した $V_- + E_1$ は，井戸型ポテンシャル $(V(q) = 0, (0 < q < L))$ そのものであり，また $V_+ + E_1$ は対応するパートナーポテンシャルの原点をずらしたもので，$0 \leq q \leq L$ で連続的な関数となっている（図 3.3 右図）．□

3.4　行列の固有値と因数分解法

超対称量子力学構造は，パートナーポテンシャルで記述される二つの力学系が，基底状態を除いて同じエネルギー固有値 $E_n^{(+)} = E_n^{(-)}$, $(n \neq 0)$ を持つことを導くが，そのスペクトル $E_n^{(n)}, (n = 1, 2, \cdots)$ 自身を明らかにしてはいない．しかし，$\hat{H}_\pm$ のようなハミルトニアンの因数分解の表現は，固有値問題への新しい視点をもたらす．一般に，非相対論的な力学系のハミルトニアンは，空間変数の 2 階微分を含む演算子である．これを 1 階微分を含む演算子の積に分解し，その代数構造から固有値を求める**因数分解法**と呼ばれる手法は，古くは 1940 年にシュレディンガーが水素原子の動径変数の状態を解く際に利用している．また，ディラックが著した『量子力学の原理（1935 年，初版）』には，既に調和振動子や角運動量の固有値問題に梯子演算子を用いる因数分解法が用いられている．このような因数分解法の構造的な基礎は，1951 年にインフェルトーハルにより整理された[*9)]．さて，因数分解法は系が束縛状態にあ

*9)　因数分解法には様々な手法があり，ここに紹介する方法はグリーン[10]により整理された形で，超ポテンシャルを用いたパートナーハミルトニアン対を，$\{\hat{H}_0, \hat{H}_1\}$, $\{\hat{H}_1, \hat{H}_2\}, \cdots$ の形で，階層的に逐次構築してゆく方法である．

り，離散的構造 $E_0 < E_1 < E_2 < \cdots$ のエネルギー固有値を持つ場合に適用できる．いま，このような系のハミルトニアンが E_0 を基底状態のエネルギーとして，$\hat{H} = \hat{A}^\dagger\hat{A} + E_0$ と因数分解できる場合を考える．調和振動子系であれば，$\hat{A} = \sqrt{\hbar\omega}\hat{a}$, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ であるが，一般的なポテンシャル問題では梯子演算子がエネルギー固有値ごとに決まることを想定して，改めて $\hat{H} = \hat{H}_0$ および $\hat{A} = \hat{A}_0$ と書く．次に，超対称量子力学系のパートナー $\hat{H}_\pm$ の関係に類似させて，$\hat{H}_1 = \hat{A}_0\hat{A}_0^\dagger + E_0$ を定義し，これを新しい梯子演算子 $(\hat{A}_1, \hat{A}_1^\dagger)$ を用いて $\hat{H}_1 = \hat{A}_1^\dagger\hat{A}_1 + E_1$ と因数分解する．$\hat{A}_1$ の選び方は一通りではなく，$\hat{A}_1 = \hat{A}_0^\dagger$ に選べば $E_1 = E_0$ に戻るので，最も大きな $E_1(\geq E_0)$ が得られるように $\hat{A}_1$ を選ぶ．この手順を繰り返すと，

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \hat{A}_0^\dagger\hat{A}_0 + E_0\,, \\
\hat{H}_1 &= \hat{A}_0\hat{A}_0^\dagger + E_0 = \hat{A}_1^\dagger\hat{A}_1 + E_1\,, \\
\hat{H}_2 &= \hat{A}_1\hat{A}_1^\dagger + E_1 = \hat{A}_2^\dagger\hat{A}_2 + E_2\,, \\
&\;\;\vdots \\
\hat{H}_n &= \hat{A}_{n-1}\hat{A}_{n-1}^\dagger + E_{n-1} = \hat{A}_n^\dagger\hat{A}_n + E_n\,, \\
\hat{H}_{n+1} &= \hat{A}_n\hat{A}_n^\dagger + E_n = \hat{A}_{n+1}^\dagger\hat{A}_{n+1} + E_{n+1}\,, \\
&\;\;\vdots
\end{aligned}
\tag{3.93}
$$

の系列が得られる．超対称パートナー $(\hat{H}_-, \hat{H}_+)$ に類似させて言えば，$(\hat{H}_n, \hat{H}_{n+1})$, $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ がパートナーとなる．このとき，$\langle\hat{A}_n^\dagger\hat{A}_n\rangle \geq 0$ から，$\hat{H}_n$ の基底状態 $|\Phi_0^{(n)}\rangle$ は $\hat{A}_n|\Phi_0^{(n)}\rangle = 0$ を満たす．そこで，

$$
|\Phi_n\rangle = N\hat{A}_0^\dagger\hat{A}_1^\dagger\cdots\hat{A}_{n-1}^\dagger|\Phi_0^{(n)}\rangle\,,\ (\,N = \text{const.}\,) \tag{3.94}
$$

と置けば，(3.93) の逐次的な $\hat{H}_n$ の定義から得られる

$$
\begin{aligned}
\hat{H}_n\hat{A}_n^\dagger &= (\hat{A}_n^\dagger\hat{A}_n + E_n)\hat{A}_n^\dagger = \hat{A}_n^\dagger(\hat{A}_n\hat{A}_n^\dagger + E_n) \\
&= \hat{A}_n^\dagger(\hat{A}_{n+1}^\dagger\hat{A}_{n+1} + E_{n+1}) \\
&= \hat{A}_n^\dagger\hat{H}_{n+1}\,,\quad (\leftrightarrow\ \hat{A}_n\hat{H}_n = \hat{H}_{n+1}\hat{A}_n\,)
\end{aligned}
\tag{3.95}
$$

を考慮して

$$
\begin{aligned}
\hat{H}|\Phi_n\rangle &= N\hat{H}_0\hat{A}_0^\dagger\hat{A}_1^\dagger\cdots\hat{A}_{n-1}^\dagger|\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&= N\hat{A}_0^\dagger\hat{H}_1\hat{A}_1^\dagger\cdots\hat{A}_{n-1}^\dagger|\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&\;\;\vdots \\
&= N\hat{A}_0^\dagger\hat{A}_1^\dagger\cdots\hat{A}_{n-1}^\dagger\hat{H}_n|\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&= E_n|\Phi_n\rangle
\end{aligned}
\tag{3.96}
$$

に至る．かくして，各段階のハミルトニアンを逐次因数分解する手順で得られる $\{E_n\}$ と $\{\hat{A}_n, \hat{A}_n^\dagger\}$ が，実際に元のハミルトニアンの固有値と固有状態を形成する梯子演算子の意味を持つことが分かる．なお，(3.94) の規格化因子 N は，再び (3.93) を用いて容易に求まり，

$$N = 1/\sqrt{(E_n - E_0)(E_n - E_1)\cdots(E_n - E_{n-1})} \tag{3.97}$$

と決定される．

練習問題 3.4.1

$|\Phi_n\rangle$ の規格化因子が (3.97) の形になることを確かめよ．

解答 (3.93) より，

$$\begin{aligned}
\|\hat{A}_0^\dagger \hat{A}_1^\dagger \cdots \hat{A}_{n-1}^\dagger |\phi_0^{(n)}\rangle\|^2 &= \langle \Phi_0^{(n)} | \hat{A}_{n-1} \cdots \hat{A}_1 \underbrace{\hat{A}_0 \hat{A}_0^\dagger}_{\hat{H}_1 - E_0} \hat{A}_1^\dagger \cdots \hat{A}_{n-1}^\dagger |\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&= \langle \Phi_0^{(n)} | \hat{A}_{n-1} \cdots \hat{A}_1 \hat{A}_1^\dagger (\hat{H}_2 - E_0) \hat{A}_2^\dagger \cdots \hat{A}_{n-1}^\dagger |\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&\vdots \\
&= \langle \Phi_0^{(n)} | \hat{A}_{n-1} \cdots \hat{A}_1 \hat{A}_1^\dagger \hat{A}_2^\dagger \cdots \hat{A}_{n-1}^\dagger (\hat{H}_n - E_0) |\Phi_0^{(n)}\rangle \\
&= (E_n - E_0) \|\hat{A}_1^\dagger \cdots \hat{A}_{n-1}^\dagger |\phi_0^{(n)}\rangle\|^2 \\
&\vdots \\
&= (E_n - E_0) \cdots (E_n - E_{n-1}).
\end{aligned}$$

ただし，$\langle \Phi_0^{(n)} | \Phi_n^{(0)} \rangle = 1$ とした．□

3.5 代表的な基本問題の再考

前節で述べた因数分解法は，基本的に離散的な固有値を持つ問題に適用可能であるが，その有効性を確かめるために，既に前章で扱われた幾つかの基本的な問題等を因数分解法の立場から再考する．

3.5.1 井戸型ポテンシャル問題の再考

ハミルトニアンを因数分解する方法は，問題ごとに工夫が必要で，発見的な要素が多い．井戸型ポテンシャルの問題に対しては，既に超対称量子力学系の観点から $\hat{H}_-$ を因数分解した表示が分かっていて，これが前節の初期ハミルトニアン $\hat{H}_0$ に相当した．これを因数分解法の 0-ステップの形に整理すると，

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \hat{A}_0^\dagger \hat{A}_0 + E_0, \ \left(E_0 = \frac{1}{2m}\left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \right) \\
&= \frac{1}{2m}\hat{p}^2, \ (q \text{ 表示} : 0 \le q \le L),
\end{aligned} \tag{3.98}$$

ただし，

$$\left.\begin{aligned}\hat{A}_0 &= \frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W_0(\hat{q}) \\ \hat{A}_0^\dagger &= -\frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W_0(\hat{q})\end{aligned}\right\},\quad W_0(\hat{q}) = -\frac{\pi}{L}\cot\left(\frac{\pi\hat{q}}{L}\right) \tag{3.99}$$

である．そこで，(3.99) の形を n-ステップの梯子演算子に拡張し，

$$\left.\begin{aligned}\hat{A}_n &= \frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W_n(\hat{q}) \\ \hat{A}_n^\dagger &= -\frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p} + W_n(\hat{q})\end{aligned}\right\},\quad W_n(\hat{q}) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}a_n\cot(k_n\hat{q})\,, \tag{3.100}$$

$(n = 0, 1, 2, \cdots)$ と置くと，$\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_n' = \frac{\hbar^2}{2m}a_nk_n + \frac{k_n}{a_n}W_n^2$ に注意して

$$\begin{aligned}\hat{H}_n = \hat{A}_n^\dagger\hat{A}_n + E_n &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + W_n(\hat{q})^2 - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_n'(\hat{q}) + E_n \\ &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \left(a_n^2 - a_nk_n\right)\cot^2(k_n\hat{q}) + \left(E_n - \frac{\hbar^2}{2m}a_nk_n\right)\end{aligned} \tag{3.101}$$

となる．これが (3.93) により

$$\begin{aligned}\hat{H}_n &= \hat{A}_{n-1}\hat{A}_{n-1}^\dagger + E_{n-1} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + W_{n-1}^2(\hat{q}) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_n'(\hat{q}) + E_{n-1} \\ &= \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + (a_{n-1}^2 + a_{n-1}k_{n-1})\cot^2(k_{n-1}\hat{q}) + \left(E_{n-1} + \frac{\hbar^2}{2m}a_{n-1}k_{n-1}\right)\end{aligned} \tag{3.102}$$

に等しい．従って，$k_n = k_{n-1} = \cdots = k_0 = \frac{\pi}{L}$ を得て，これからさらに

$$a_n^2 - a_{n-1}^2 = (a_n + a_{n-1})k_0\,, \tag{3.103}$$

$$E_n - E_{n-1} = \frac{\hbar^2}{2m}(a_n + a_{n-1})k_0 \tag{3.104}$$

が導かれる．こうして，最初の漸化式より $a_n - a_{n-1} = k_0$，即ち $a_n = nk_0$ が得られ，この結果を第 2 の漸化式に使って，$E_n - E_{n-1} = \frac{\hbar^2}{2m}k_0$，即ち $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}(nk_0)^2$ が得られる．一方，(3.99) より $a_0 = k_0 = \frac{\pi}{L}$ であったから，最終的に良く知られた結果

$$E_n = \frac{1}{2m}\left\{\frac{(n+1)\pi}{L}\right\}^2\,,\ (n = 0, 1, 2, \cdots)$$

に至る．

3.5.2 水素型原子模型の再考

水素型原子模型は 3 次元の力学系であるが，角運動量を含む部分を最初に固有値で置き換えて，動径座標 r のみに依存する記述に移れば 1 次元の問題となり，因数分解法の適用できる形に持ち込める．この場合のハミルトニアン演算

子を与えるために，（重心静止系での）水素型原子模型のエネルギー固有値方程式 (2.116) で関数変換 $\chi_{E,l}(r) = \frac{1}{r}\Phi_E^{(l)}(r)$ を実行して，

$$\left[\frac{\hbar^2}{2mr^2}\left\{l(l+1) - r^2\frac{d^2}{dr^2}\right\} - \frac{Ze^2}{r} - E\right]\Phi_E^{(l)}(r) = 0 \tag{3.105}$$

の形に表す．この形から，定まった l の下での水素型原子模型のエネルギー固有値を求めることは，l に依存するポテンシャル

$$V_l(r) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{Ze^2}{r} \tag{3.106}$$

を持つ 1 次元系のハミルトニアン

$$\hat{H}_l = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + V_l(r), \quad \left(\hat{p}_r = -i\hbar\frac{d}{dr}\right) \tag{3.107}$$

の固有値問題に帰着することが分かる．これで，因数分解法を適用する準備ができたことになり，これを実際に試みたのがシュレディンガーであった．

そこで，まず (3.107) を因数分解法の 0-ステップのハミルトニアン演算子と考えて，改めて $\hat{H}_0^{(l)} = \hat{H}_l$ と書き，対応する梯子演算子を

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}_0^{(l)} &= \frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p}_r + W_0^{(l)}(r) \\ \hat{A}_0^{(l)\dagger} &= -\frac{i}{\sqrt{2m}}\hat{p}_r + W_0^{(l)}(r) \end{aligned}\right\}, \quad W_0^{(l)}(r) = \frac{a_0^{(l)}}{r} + b_0^{(l)} \tag{3.108}$$

と置く．ここで $W_0^{(l)}$ の形は，V_l が r^{-1} と r^{-2} を含むことからの試みである．実際，この時 $\hat{A}_0^{(l)\dagger}\hat{A}_0^{(l)} = \frac{1}{2m}\hat{p}_r^2 + W_0^{(l)2} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_0^{(l)\prime}$，ただし

$$W_0^{(l)2} - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}W_0^{(l)\prime} = \frac{1}{r^2}a_0^{(l)}\left(a_0^{(l)} + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\right) + \frac{2a_0^{(l)}b_0^{(l)}}{r} + b_0^{(l)2} \tag{3.109}$$

であり，この形と V_l の r^{-1}, r^{-2} 項を比較して

i) $a_0^{(l)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}l$ および $b_0^{(l)} = -\frac{\sqrt{2m}}{2\hbar l}Ze^2$

もしくは，

ii) $a_0^{(l)} = -\frac{\hbar}{\sqrt{2m}}(l+1)$ および $b_0^{(l)} = \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar}\frac{Ze^2}{l+1}$

の解がある．実際には，i) の解は $\hat{A}_0^{(l)}$ を消滅演算子的に扱う枠組みの中では排除される（練習問題 3.5.1）．こうして，ii) より 0-ステップの因数分解の構造

$$\hat{H}_0^{(l)} = \hat{A}_0^{(l)\dagger}\hat{A}_0^{(l)} + E_0^{(l)}, \quad \left(E_0^{(l)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(l+1)^2}\right) \tag{3.110}$$

が得られる．

次に，簡単な計算から

$$\hat{A}_0^{(l)}\hat{A}_0^{(l)\dagger} + E_0^{(l)} = \hat{A}_0^{(l+1)\dagger}\hat{A}_0^{(l+1)} + E_0^{(l+1)} \tag{3.111}$$

が確かめられる．そこで，$\hat{A}_1^{(l)} = \hat{A}_0^{(l+1)}$, $E_1^{(l)} = E_0^{(l+1)}$ として，1-ステップの因数分解の構造

$$\hat{H}_1^{(l)} = \hat{A}_0^{(l)} \hat{A}_0^{(l)\dagger} + E_0^{(l)} = \hat{A}_1^{(l)\dagger} \hat{A}_1^{(l)} + E_1^{(l)}, \tag{3.112}$$

ただし，

$$E_1^{(l)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(l+2)^2} \tag{3.113}$$

が得られる．この手順を繰り返せば，$\hat{A}_k^{(l)} = \hat{A}_0^{(l+k)}$, $E_k^{(l)} = E_0^{(l+k)}$ となって，既知の水素型原子模型のエネルギースペクトル

$$E_k^{(l)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{(l+1+k)^2}\,, \ (k = 0, 1, 2, \cdots) \tag{3.114}$$

が導かれる．k は角運動量の大きさが l の部分空間の中の梯子演算子を逐次構成する量子数であり，$n = l + 1 + k$ は主量子数に他ならない．

練習問題 3.5.1
$a_0^{(l)}, b_0^{(l)}$ に対する i) の選択が，不都合をもたらすことを説明せよ．

解答 $\langle \hat{H}_0^{(l)} \rangle \geq E_0^{(l)}$ であるためには，基底状態 $\phi_0^{(l)}(r)$ は

$$\hat{A}\phi_0^{(l)}(r) \sim \left(\frac{\hbar}{\sqrt{2m}} \frac{d}{dr} + b_0^{(l)} \right) \phi_0^{(l)}(r) = 0, \quad (r \gg 1)$$

を満たさなくてはならない．従って，$\phi_0^{(l)}(r) \sim \mathrm{const.} \times e^{-\frac{\sqrt{2m}}{\hbar} b_0^{(l)} r}$, $(r \gg 1)$ であるが，i) の場合は $b_0^{(l)} < 0$ のために $\phi_0^{(l)}$ は規格化可能な状態とならない．
□

第 4 章
量子力学と経路積分

量子力学における経路積分の手法は，1948 年にファインマンにより定式化されたが，これを発見する上でディラックにより 1932 年に発表された「量子力学におけるラグランジアン」の考え方が，大きな示唆を与えた．経路積分は，量子力学における様々な問題を解く新しい実用的な方法を与えるとともに，量子力学そのものの考え方にも大きな変革をもたらした．

4.1　シュレディンガー方程式とグリーン関数

時間に依存するシュレディンガー方程式 (2.5) は，時間に関する 1 階の微分方程式であるため，任意の時刻の初期状態を与えれば，その後の状態は一意的に決まり，初期時刻を $t=0$ に選んだ場合には (2.6) の形となる．容易に確かめられるように，初期時刻を t_a，終時刻を $t_b(\geq t_a)$ に選んだ場合には，

$$|\psi(t_b)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}|\psi(t_a)\rangle \tag{4.1}$$

が，初期条件を与えたシュレディンガー方程式

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_b}-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}\right)|\psi(t_b)\rangle = 0, \quad \left(\lim_{t_b\to t_a}|\psi(t_b)\rangle = |\psi(t_a)\rangle\right) \tag{4.2}$$

の解となっている．簡単のために，考えている系が正準演算子 $(\hat{q},\hat{p})$ で記述される 1 次元の系であるとして，q-表示の状態 $\psi(q,t)=\langle q|\psi(t)\rangle$ を用いると，(4.1) は

$$\begin{aligned}\psi(q_b,t_b) &= \langle q_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}|\psi(t_a)\rangle \\ &= \int dq_a \langle q_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b-t_a)}|q_a\rangle\psi(q_a,t_a), \quad (t_b\geq t_a)\end{aligned} \tag{4.3}$$

となる．上式の積分核*1) を積分の外に取り出し

*1)　(4.3) のように，状態空間の線形写像 $\{\psi(t_a)\}\to\{\psi(t_b)\}$ が積分演算子として与えられるとき，それを定義する被積分関数を積分核と言う．

$$G_{ba} = \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b - t_a)} | q_a \rangle \theta(t_b - t_a) = \langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle \theta(t_b - t_a) \quad (4.4)$$

と書く．ここで，$\theta(t)$ は時間順序を保つための階段関数で

$$\theta(t) = \begin{cases} 1 & (t > 0), \\ 0 & (t < 0) \end{cases} \quad (4.5)$$

で定義され，汎関数の微分の意味で $\frac{d}{dt}\theta(t) = \delta(t)$ を満たす．従って，$T_{ba} = t_b - t_a$ と置き，$\langle q_b | q_a \rangle = \delta(q_b - q_a)$ に注意すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_b} G_{ba} &= \langle q_b | \frac{1}{i\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H} T_{ba}} | q_a \rangle \theta(T_{ba}) + \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H} T_{ba}} | q_a \rangle \delta(T_{ba}) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_b G_{ba} + \delta(q_b - q_a) \delta(T_{ba}), \end{aligned}$$

あるいは，

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_b} - \frac{1}{i\hbar} \hat{H}_b \right) G_{ba} = \delta(q_b - q_a) \delta(T_{ba}) \quad (4.6)$$

を得る．ただし，$\hat{H}_b$ はハミルトニアン演算子 $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})$ の q_b-表示 $\hat{H}_b = \hat{H}(q_b, -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_b})$ である．

(4.6) は，G_{ba} がシュレディンガー方程式の逆演算子

$$\hat{G} = \left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar} \left(\hat{H} - i\epsilon \right) \right]^{-1}, \ (\epsilon = +0) \quad (4.7)$$

に対する q-表示の行列要素 $G_{ba} = \langle q_b | \hat{G} | q_a \rangle \delta(t_b - t_a)$ であることを言う．この意味で，G_{ba} は**時間に依存するシュレディンガー方程式のグリーン関数**である．また，G_{ba} から**時間に依存しないシュレディンガー方程式のグリーン関数**が

$$\begin{aligned} R_{ba}(E) &\equiv \langle q_b | (\hat{H} - E - i\epsilon)^{-1} | q_a \rangle, \ (\epsilon = +0) \\ &= \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dT_{ba} e^{\frac{i}{\hbar}(E + i\epsilon) T_{ba}} G_{ba}(T_{ba}) \end{aligned} \quad (4.8)$$

と定義できる．そこで，もしハミルトニアン演算子が離散的な固有状態 $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$, ($\langle E_n | E_m \rangle = \delta_{nm}; n, m = 0, 1, 2, \cdots$) の完全系を持つとすれば，$\phi_n(q) = \langle q | E_n \rangle$ として

$$R_{ba}(E) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\phi_n(q_b) \phi_n^*(q_a)}{E_n - E - i\epsilon} \quad (4.9)$$

となり，系のエネルギー固有値は，G_{ba} から T_{ba} に関するラプラス型の変換を行って得られる $R_{ba}(E)$ の特異点として位置づけられる．

練習問題 4.1.1

$\frac{d}{dt}\theta(t) = \delta(t)$ を確かめよ．

解答 汎関数との内積が定義できる任意の関数 $f(t)$ に対し,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \frac{d}{dt}\theta(t) = \lim_{R\to\infty} \int_{-R}^{R} dt \left[\frac{d}{dt} \{f(t)\theta(t)\} - \frac{df(t)}{dt}\theta(t) \right]$$
$$= \lim_{R\to\infty} \left[\big[f(t)\theta(t)\big]_{-R}^{R} - \int_0^R dt \frac{df(t)}{dt} \right]$$
$$= \lim_{R\to\infty} [f(R) - (f(R) - f(0))] = f(0).$$

この意味で,θ-関数の微分は δ-関数として扱ってよい.□

練習問題 4.1.2

$\hat{G}$ の行列要素が,実際 (4.4) に一致することを確かめよ.

解答 $\epsilon \to +0$ は,計算の最後にとることにすると,

$$\langle q_b|\hat{G}|q_a\rangle\delta(t_b - t_a) = \langle q_b| \int_0^{\infty} d\tau e^{-\tau\left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{i\hbar}(\hat{H} - i\epsilon)\right]} |q_a\rangle\delta(t_b - t_a)$$
$$= \int_0^{\infty} d\tau \langle q_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}|q_a\rangle e^{-\tau\frac{\epsilon}{\hbar}} e^{-\tau\frac{\partial}{\partial t_b}} \delta(t_b - t_a)$$
$$= \int_0^{\infty} d\tau \langle q_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\tau\hat{H}}|q_a\rangle \delta(t_b - t_a - \tau)$$
$$= \langle q_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_b - t_a)}|q_a\rangle\theta(t_b - t_a)$$

となり,グリーン関数の最初の定義式に帰着する.□

練習問題 4.1.3

(4.8) の逆変換を与えよ.

解答 $T_{ba} > 0$ として,

$$G_{ba}(T_{ba}) = \int \frac{dE}{2\pi i} e^{-\frac{i}{\hbar}ET_{ba}} R_{ba}(E) = \sum_n \phi_n(q_b)\phi_n^*(q_a) \int \frac{dE}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}ET_{ba}}}{E_n - E - i\epsilon}$$

と置けばよい.実際,$\left|e^{-\frac{i}{\hbar}ET_{ba}}\right| \to 0$, $(\mathrm{Im}\, E \to -\infty)$ から,E の積分路は複素平面下方に移動できるため $\int \frac{dE}{2\pi i} \frac{e^{-\frac{i}{\hbar}ET_{ba}}}{E_n - E - i\epsilon} = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T_{ba}}$ となり,これにより

$$G_{ba}(T_{ba}) = \sum_n \phi_n(q_b)\phi_n^*(q_a) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T_{ba}} = \sum_n \langle q_b|E_n\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T_{ba}} \langle E_n|q_a\rangle,$$

および $\sum_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T_{ba}} |E_n\rangle\langle E_n| = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T_{ba}}$ により,元の定義に戻る.□

4.2 グリーン関数の経路積分表示

前節に述べたように,与えられた初期状態の下で任意の時刻の状態を求める作業は,グリーン関数を求める作業に帰着した.このグリーン関数は,量子力

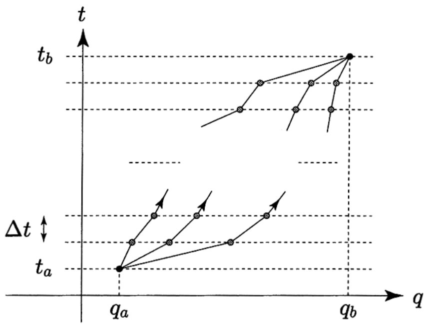


図 4.1 経路にわたる積分：図は，時間間隔 Δt の折れ線で近似された a から b に至る経路．折れ線の節点で積分し，$\Delta t \to 0$ の極限をとることにより，a から b に至る経路に沿った遷移確率振幅の和を定義する．

学の基本的な知識を基に，経路積分と呼ばれる形に表すことができる．

グリーン関数の経路積分表示を求めるために，(4.4) の時間間隔 $T = t_b - t_a\ (> 0)$ を N 分割して $\Delta t = T/N$ とし，これに応じて $t_a = t_0, t_b = t_N$，また $t_i = i\Delta t + t_0, (i = 0, 1, \cdots, N)$ と書くことにする．この時，位置の演算子 $\hat{q}$ の固有状態 $\{|q\rangle\}$ の完全性により，

$$
\begin{aligned}
G_{ba} &= \langle q_b| \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} \cdots e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}}_{N\ \text{項}} |q_a\rangle \\
&= \int \left(\prod_{j=1}^{N-1} dq_j \right) \prod_{i=1}^{N} \langle q_i| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} |q_{i-1}\rangle
\end{aligned} \tag{4.10}
$$

と書ける．ここで $\Delta t_i = t_i - t_{i-1}$ に注意すると，(4.10) の被積分関数の各項は，ハイゼンベルク表示の位置の演算子 $\hat{q}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \hat{q} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ の固有状態

$$
|q, t\rangle = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |q\rangle, \quad (\ \hat{q}(t)|q, t\rangle = q|q, t\rangle\ ) \tag{4.11}
$$

を用いて，$\langle q_i| e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t} |q_{i-1}\rangle = \langle q_i, t_i | q_{i-1}, t_{i-1}\rangle$ と書ける．従って (4.10) は，始点 (q_a, t_a) と終点 (q_b, t_b) を固定し，時間を N 分割してできる微小区間 $(q_{i-1}, t_{i-1}) \to (q_i, t_i), (i = 1, 2, \cdots, N)$ の遷移の確率振幅の積を，折れ線の節点で積分したものと言える（図 4.1）．

各区間の遷移の確率振幅は，$N \to \infty$ の極限を考えると，Δt の 1 次近似の意味で，$\{|p\rangle\}$ を運動量演算子の固有状態として

$$
\begin{aligned}
\langle q_i, t_i | q_{i-1}, t_{i-1}\rangle &\simeq \langle q_i | 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t | q_{i-1}\rangle \\
&= \int dp_i \langle q_i|p_i\rangle \langle p_i|q_{i-1}\rangle \left[1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \frac{\langle p_i|\hat{H}|q_{i-1}\rangle}{\langle p_i|q_{i-1}\rangle} \right] \\
&\simeq \int \frac{dp_i}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t \left(p_i \frac{q_i - q_{i-1}}{\Delta t} - H_i \right)}
\end{aligned} \tag{4.12}
$$

となる．ここで，$H_i = \langle p_i|\hat{H}|q_{i-1}\rangle / \langle p_i|q_{i-1}\rangle$ であり，その具体的な形は，ハミルトニアン演算子を定義する $(\hat{q}, \hat{p})$ の順序の規則に依存する．ハミルトニアンが，運動エネルギーとポテンシャルエネルギーに分離する $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{q})$ の場合には，順序の問題はなく，Δt より高次の無限小を無視して $\Delta t H_i \simeq \Delta t \left[\frac{1}{2m}p_i^2 + V(q_i)\right]$ である．一方，古典的なハミルトニアン $H(q,p)$ から，$(\hat{q}, \hat{p})$ に関するワイル順序の規則に従ってハミルトニアン演算子を定義したものは，

$$\hat{H}_{\mathrm{W}}(\hat{q}, \hat{p}) \equiv H\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\beta}\right) e^{i\alpha\hat{q}+i\beta\hat{p}}\Big|_{\alpha=\beta=0} \tag{4.13}$$

である．このとき，

$$\langle q'|\hat{H}_{\mathrm{W}}|q\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q'-q)} H\left(\frac{q'+q}{2}, p\right) \tag{4.14}$$

が成立し，これから

$$\begin{aligned} H_i &= \frac{1}{\langle p_i|q_{i-1}\rangle} \int dq_i \langle p_i|q_i\rangle \langle q_i|\hat{H}_{\mathrm{W}}|q_{i-1}\rangle \\ &= H\left(\frac{q_i + q_{i-1}}{2}, p_i\right) \end{aligned} \tag{4.15}$$

を得て，H_i は位置座標に関しては区間の中間点を，また運動量は $\Delta q_i = q_i - q_{i-1}$ の共役量を用いたハミルトニアンになることが分かる．何れの場合も，$\Delta t H_i$ の中では q_i と q_{i-1} の差は高次の無限小であり，$N \to \infty$ の極限で (4.12) は正しい遷移の確率振幅を与えるから，グリーン関数 (4.10) に対し

$$\begin{aligned} G_{ba} &= \lim_{N\to\infty} \int \left(\prod_{j=1}^{N-1} dq_j\right) \int \left(\prod_{i=1}^{N} \frac{dp_i}{2\pi\hbar}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N} \Delta t\left(p_i \frac{\Delta q_i}{\Delta t} - H_i\right)} \\ &\equiv \int_a^b \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt (p\dot{q} - H(q,p))} \end{aligned} \tag{4.16}$$

の表式を得る．ここで $\mathcal{D}q, \mathcal{D}p$ は，(4.16) の極限を記号的に表した相空間における汎関数積分の測度であり，とくに $\mathcal{D}q$ は q_a から q_b に至る q 空間の経路にわたる積分の意味を持つ．古典力学によれば，(4.16) の被積分関数

$$S_p[q,p] = \int_{t_a}^{t_b} dt\,(p\dot{q} - H(q,p)) \tag{4.17}$$

は相空間 (q,p) 上の力学系の作用 (A.13) であり，ルジャンドル変換により系のラグランジアン $L(q,\dot{q})$ の時間積分として表すことができる．具体的に，$H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q)$ の場合で考えると，

$$G_{ba} = \lim_{N\to\infty} \int \left(\prod_{j=1}^{N-1} dq_j\right) \int \left(\prod_{i=1}^{N} \frac{dp_i}{2\pi\hbar}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N} \Delta t\left[p_i \frac{\Delta q_i}{\Delta t} - \left(\frac{1}{2m}p_i^2 + V(q_i)\right)\right]}$$

$$= \lim_{N\to\infty} \int \left(\prod_{j=1}^{N-1} dq_j \right) \left(\frac{m}{2\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{N}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^{N} \Delta t \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\Delta q_i}{\Delta t} \right)^2 - V(q_i) \right]}$$

$$= \int_a^b \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt \left(\frac{m}{2} \dot{q}^2 - V(q) \right)} \tag{4.18}$$

となる．この場合の $\mathcal{D}q$ も，多重積分の $N \to \infty$ 極限を記号的に表した記号であり，有限の N に対する規格化因子は (4.16) と異なっている．(4.18) の指数の因子は，ラグランジアン

$$S[q] = \int_{t_a}^{t_b} dt L(q, \dot{q}), \quad \left(L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2m} \dot{q}^2 - V(q) \right) \tag{4.19}$$

であり，$L(q, \dot{q})$ と $H(q,p)$ はルジャンドル変換で結ばれる．こうして (4.4) のグリーン関数は，経路積分の表式

$$G_{ba} = \int_a^b \mathcal{D}q \int \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} S_p[q,p]} = \int_a^b \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} \tag{4.20}$$

を得ることになった．経路積分の最終的な表式は，ファインマンにより与えられたが，第 1 章で述べたように，ディラックは (4.10) の表式に結び付けて $\langle q_i, t_i | q_{i-1}, t_{i-1} \rangle \sim \exp \left[\frac{i}{\hbar} \Delta t L(q(t_i), \dot{q}(t_i)) \right]$ を「対応」と表現しており，ファインマンはこれを $N \to \infty$ の極限において「同一」と見做したのである．

経路積分は，シュレディンガー方程式の解を古典力学の**作用**に結び付ける新しい視点を与えると同時に，実用的な計算手段をもたらした．例えば，ラグランジアンが $L = \frac{m}{2} \dot{q}^2$ で与えられる自由粒子の場合，運動方程式は $\ddot{q} = 0$ であり，始点 (q_a, t_a) と終点 (q_b, t_b) を通過する古典解は

$$q_c(t) = \frac{q_b - q_a}{T_{ba}} (t - t_a) + q_a \quad (T_{ba} = t_b - t_a) \tag{4.21}$$

である．そこで，変換 $q(t) \equiv q'(t) + q_c(t)$, $(q'(t_a) = q'(t_b) = 0)$ を行うと，

$$S[q] = \int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2} \left(\dot{q}' + \frac{q_b - q_a}{T_{ba}} \right)^2 = S[q'] + \frac{m}{2} \frac{(q_b - q_a)^2}{T_{ba}} \tag{4.22}$$

となる．この形を，$\mathcal{D}q = \mathcal{D}q'$ に注意して経路積分の表式に代入すると

$$G_{ba} = N_{ba} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q_b - q_a)^2}{T_{ba}}}, \quad \left(N_{ba} = \int \mathcal{D}q' e^{\frac{i}{\hbar} S[q']} \right) \tag{4.23}$$

を得る．ここで，N_{ba} は T_{ba} に依存する定数であり，遷移確率振幅の結合則

$$\int dq_b G_{cb} G_{ba} = G_{ca} \tag{4.24}$$

から，$N_{ba} = \sqrt{m/(2\pi i \hbar T_{ba})}$ と決定される．こうして得られた遷移の確率振幅は，(3.7) で求めた結果と一致し，

$$G_{ba} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T_{ba}}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2} \frac{(q_b - q_a)^2}{T_{ba}}} \tag{4.25}$$

となる．

練習問題 4.2.1

色々な問題で有用な公式

$$
\boxed{e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]} \quad ([\hat{A},\hat{B}];\ \text{c-数})}
$$

を確かめ，ワイル順序を定義する因子 (4.13) が $e^{i\alpha\hat{q}+i\beta\hat{p}} = e^{i\alpha\hat{q}}e^{i\beta\hat{p}}e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta}$ と書けることを導け．

解答 λ を実数として $e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = e^{\lambda\hat{A}}U(\lambda)$ とおき，両辺を λ で微分すると

$$
\begin{aligned}
(\text{左辺}) &= (\hat{A}+\hat{B})e^{\lambda(\hat{A}+\hat{B})} = (\hat{A}+\hat{B})e^{\lambda\hat{A}}U(\lambda) \\
&= (\text{右辺}) = \hat{A}e^{\lambda\hat{A}}U(\lambda) + e^{\lambda\hat{A}}\frac{dU(\lambda)}{d\lambda}.
\end{aligned}
$$

従って，

$$
\frac{dU(\lambda)}{d\lambda} = e^{-\lambda\hat{A}}\hat{B}e^{\lambda\hat{A}}U(\lambda) = (\hat{B} - \lambda[\hat{A},\hat{B}])U(\lambda)
$$

から，$U(0) = 1$ に注意して $U(\lambda) = e^{\lambda\hat{B}-\frac{\lambda^2}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$ を得て，$\lambda = 1$ と置けば確かめるべき公式となる．とくに，$\hat{A} = i\alpha\hat{q}$, $\hat{B} = i\beta\hat{p}$ の場合は $[\hat{A},\hat{B}] = -i\hbar\alpha\beta$ であり，求める結果となる．□

練習問題 4.2.2

前問の結果を利用して，ワイル順序を用いたハミルトニアン演算子の行列要素 (4.14) を確かめよ．

解答 $\langle q'|e^{i\beta\hat{p}}|q\rangle = \delta(q' - q + \hbar\beta)$ を考慮して，

$$
\begin{aligned}
\langle q'|\hat{H}_{\mathrm{W}}|q\rangle &= \lim_{\alpha,\beta\to 0} H\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\beta}\right)\langle q'|e^{i\alpha\hat{q}}e^{i\beta\hat{p}}e^{\frac{i\hbar}{2}\alpha\beta}|q\rangle \\
&= \lim_{\alpha,\beta\to 0} H\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\beta}\right)e^{i\alpha q' + \frac{i\hbar}{2}\alpha\beta}\delta(q' - q + \hbar\beta) \\
&= \lim_{\alpha,\beta\to 0} H\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\alpha}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\beta}\right)e^{i\alpha\frac{q'+q}{2}}\int\frac{dp}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p(q'-q+\hbar\beta)} \\
&= \int\frac{dp}{2\pi\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}p(q'-q)}H\left(\frac{q'+q}{2}, p\right). \qquad \square
\end{aligned}
$$

練習問題 4.2.3

グリーン関数の結合則 (4.24) から，実際に $N_{ba} = \sqrt{m/(2\pi i\hbar T_{ba})}$ の規格化因子が決まることを確かめよ．

解答 ガウス積分の性質

$$
\int dy e^{-A(x-y)^2 - B(y-x)^2} = \sqrt{\frac{\pi}{A+B}}e^{-\frac{(x-z)^2}{\frac{1}{A}+\frac{1}{B}}}, \quad (\mathrm{Re}\,A,\ \mathrm{Re}\,B \geq 0)
$$

を，$A = \frac{m}{2i\hbar T_{cb}}$, $B = \frac{m}{2i\hbar T_{ba}}$ と置いて (4.24) に適用する．$A + B = \frac{2i\hbar}{m}\frac{T_{cb}T_{ba}}{T_{ca}}$ および $\frac{1}{A} + \frac{1}{B} = -\frac{im}{2\hbar T_{ca}}$ に注意すると，

$$N_{ca}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_c-q_a)^2}{T_{ca}}} = N_{cb}N_{ba}\int dq_b e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_c-q_b)^2}{T_{cb}}} e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_b-q_a)^2}{T_{ba}}}$$
$$= N_{cb}N_{ba}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar}{m}\frac{T_{cb}T_{ba}}{T_{ca}}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(q_c-q_a)^2}{T_{ca}}}$$

から，$N_{ca}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar T_{ca}}{m}} = N_{cb}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar T_{cb}}{m}} \times N_{ba}\sqrt{\frac{2\pi i\hbar T_{ba}}{m}}$ でなくてはならない．T_{cb}, T_{ba} は任意であるから，結局 $N_{ba} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T_{ba}}}$ 等々である．□

4.3 3 次元球対称ポテンシャルの下での経路積分

以上の議論は，多自由度の力学系であっても，系を記述する力学変数の空間が平坦で直交座標系をなす場合にはそのまま成立し，例えば 3 次元空間の 1 粒子に対するグリーン関数は，

$$G_{ba} = \int_a^b \mathcal{D}\boldsymbol{r} e^{\frac{1}{\hbar}\int_{t_q}^{t_b} dt\left(\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2 - V(\boldsymbol{r})\right)} \tag{4.26}$$

の形の経路積分で表される．しかし, ポテンシャルが球対称 $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$, $(r = |\boldsymbol{r}|)$ の場合には，上の経路積分を極座標 (r, θ, φ) を用いて表すことにより，系の角運動量の情報を含めた表式を与えることができる．

この目的のために，3 次元空間の位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の固有状態

$$\hat{\boldsymbol{r}}|\boldsymbol{r}\rangle = \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle\,, \quad \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{4.27}$$

を，単位球面ベクトル $\hat{\boldsymbol{\Omega}}(\theta,\varphi) = \boldsymbol{r}/r = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$ を用いて $|\boldsymbol{r}\rangle = |r\rangle \otimes |\hat{\boldsymbol{\Omega}}\rangle$ と表記する．このとき，空間積分の測度が $d^3\boldsymbol{r} = r^2 dr d\Omega$, $(d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi)$ であり，任意関数 f の座標表示が

$$\begin{aligned} f(r,\theta,\varphi) = f(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|f\rangle &= \int d^3\boldsymbol{r}'\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|f\rangle \\ &= \int_0^\infty r'^2 dr' \int d\Omega' \langle r|r'\rangle\langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}|\hat{\boldsymbol{\Omega}}'\rangle f(r',\theta',\varphi') \end{aligned} \tag{4.28}$$

と書けることから，$|r\rangle$, $|\hat{\boldsymbol{\Omega}}\rangle$ の規格化は

$$\langle r|r'\rangle = r^{-2}\delta(r-r'), \quad \langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}|\hat{\boldsymbol{\Omega}}'\rangle = (\sin\theta)^{-1}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi') \tag{4.29}$$

となる．また，$|\hat{\boldsymbol{\Omega}}\rangle$ による角運動量の固有状態 $|l,\mu\rangle$, $(l = 0,1,2,\cdots;\mu = -l,\cdots,l)$ の座標表示は，位相の任意性を除いて球面調和関数に一致し，$Y_{l\mu}(\theta,\varphi) = Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}) = \langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}|l,\mu\rangle$ とおくことができる*2)．

さて，3 次元空間の球対称ポテンシャル $V(r)$ の下にある質量 m の粒子のハ

*2) このとき，球面調和関数の性質

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi} Y_{l\mu}^*(\theta,\varphi)Y_{l'\mu'}(\theta,\varphi)d\Omega = \delta_{ll'}\delta_{\mu\mu'}\,,$$

および

ミルトニアン演算子は，練習問題 2.6.4 より軌道角運動量演算子を $\hat{\boldsymbol{L}}\,(=\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}})$ として，

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2+\frac{1}{2m}\frac{\hat{\boldsymbol{L}}^2}{r^2}+V(r),\quad\left(\hat{p}_r\equiv -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)\right)\tag{4.30}$$

と書けた．とくに角運動量の大きさが l の部分空間では，角運動量の固有状態 $|l,\mu\rangle$, $(l=0,1,2,\cdots;\,\mu=-l,\cdots,l)$ により $\hat{H}|l,\mu\rangle=|l,\mu\rangle\hat{H}^{(l)}$ で部分空間のハミルトニアンを与えることができ，具体的に

$$\hat{H}^{(l)}=\frac{1}{2m}\hat{p}_r^2+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{l(l+1)}{r^2}+V(r)\tag{4.31}$$

となる．そこで，(4.10) に対応し，時間を N 分割して微小時間グリーン関数の積の極限で表されるシュレディンガー方程式のグリーン関数は，$T=t_b-t_a\,(>0)$, $\Delta t=\frac{T}{N}$ および $(\boldsymbol{r}_a,\boldsymbol{r}_b)=(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_N)$ として，

$$\begin{aligned}
G_{ba}&=\langle\boldsymbol{r}_b|e^{-\frac{i}{\hbar}T\hat{H}}|\boldsymbol{r}_a\rangle\\
&=\lim_{N\to\infty}\int\prod_{k=1}^{N-1}d^3\boldsymbol{r}_k\prod_{i=1}^{N}\langle\boldsymbol{r}_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}}|\boldsymbol{r}_{i-1}\rangle\\
&=\lim_{N\to\infty}\int\prod_{k=1}^{N-1}r_k^2dr_kd\Omega_k\prod_{i=1}^{N}\sum_{l_i=0}^{\infty}\sum_{\mu_i=-l_i}^{l_i}\\
&\quad\times\langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}_i|l_i\mu_i\rangle\langle r_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}^{(l)}}|r_{i-1}\rangle\langle l_i\mu_i|\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{i-1}\rangle\\
&=\lim_{N\to\infty}\prod_{k=1}^{N-1}\int_0^\infty r_k^2dr_k\int d\Omega_k\prod_{i=1}^{N}\sum_{l_i=0}^{\infty}\sum_{\mu_i=-l_i}^{l_i}\\
&\quad\times Y_{l_i\mu_i}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_i)\langle r_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}^{(l_i)}}|r_{i-1}\rangle Y^*_{l_i\mu_i}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{i-1})\\
&=\lim_{N\to\infty}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l}Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_N)Y^*_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_0)\prod_{k=1}^{N-1}\int_0^\infty r_k^2dr_k\\
&\quad\times\prod_{i=1}^{N}\langle r_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}^{(l)}}|r_{i-1}\rangle
\end{aligned}\tag{4.32}$$

と表すことができる．このとき，(4.29) の規格化と $A(\hat{p}_r)f(r)=r^{-1}A(-i\hbar\partial_r)r\times f(r)$ を考慮すると，Δt の 1 次近似の意味で，

$$\langle r_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}^{(l)}(\hat{p}_r,r)}|r_{i-1}\rangle\simeq\left[1-\frac{i}{\hbar}\Delta t\hat{H}^{(l)}(\hat{p}_{r_i},r_i)\right]\langle r_i|r_{i-1}\rangle$$

$$\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l}Y_{l\mu}(\theta,\varphi)Y^*_{l\mu}(\theta',\varphi')=(\sin\theta)^{-1}\delta(\theta-\theta')\delta(\varphi-\varphi')$$

は，それぞれ $\langle l,\mu|l',\mu'\rangle=\delta_{ll'}\delta_{\mu\mu'}$ と $\langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}|\left(\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l}|l,\mu\rangle\langle l,\mu|\right)|\hat{\boldsymbol{\Omega}}'\rangle=\langle\hat{\boldsymbol{\Omega}}|\hat{\boldsymbol{\Omega}}'\rangle$ に帰着する．

$$= r_i^{-1}\left[1 - \frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}^{(l)}(-i\hbar\partial_{r_i}, r_i)\right] r_i\langle r_i|r_{i-1}\rangle \tag{4.33}$$

$$\simeq \frac{1}{r_i r_{i-1}}\int \frac{dk}{2\pi} e^{-\frac{i}{\hbar}\Delta t \hat{H}^{(l)}(k,r_i)+ik(r_i-r_{i-1})}$$

$$= \frac{1}{r_i r_{i-1}}\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}} e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{r_i-r_{i-1}}{\Delta t}\right)^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_i^2} - V(r_i)\right\}} \tag{4.34}$$

が導かれる．この形を (4.32) に代入して，

$$G_{ba}(T) = \frac{1}{r_b r_a}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l} Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b)Y_{l\mu}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)\lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{k=1}^{N-1}\int_0^{\infty} dr_k$$
$$\times e^{\frac{i}{\hbar}\sum_{i=1}^{N}\Delta t\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{r_i-r_{i-1}}{\Delta t}\right)^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_i^2} - V(r_i)\right\}} \tag{4.35}$$

となり，動径方向の経路積分の測度を $\mathcal{D}r = \lim_{N\to\infty}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta t}\right)^{\frac{N}{2}}\prod_{k=1}^{N-1} dr_k$ の極限の意味で理解して，最終的に

$$G_{ba}(T) = \frac{1}{r_b r_a}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l} Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b)Y_{l\mu}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)G_{ba}^{(l)}(T), \tag{4.36}$$

ただし

$$G_{ba}^{(l)}(T) = \int_a^b \mathcal{D}r e^{\frac{i}{\hbar}S^{(l)}[r]},$$
$$S^{(l)}[r] = \int_{t_a}^{t_b} dt\left(\frac{m}{2}\dot{r}^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V(r)\right) \tag{4.37}$$

の表式に至る．(4.36), (4.37) が，球対称なポテンシャル $V(r)$ の下でシュレディンガー方程式のグリーン関数を経路積分で表示する際の，基本形の一つである．また，時間に依存しないシュレディンガー方程式のグリーン関数は，(4.8) に従って

$$R_{ba}(E) = \langle \boldsymbol{r}_b|(\hat{H} - E - i\epsilon)^{-1}|\boldsymbol{r}_a\rangle = \frac{i}{\hbar}\int_0^{\infty} dT e^{-\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)T}G_{ba}(T)$$
$$= \frac{1}{r_b r_a}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l} Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b)Y_{l\mu}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)R_{ba}^{(l)}(E) \tag{4.38}$$

および

$$R_{ba}^{(l)}(E) = \frac{i}{\hbar}\int_0^{\infty} dT\,\underbrace{e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)T}G_{ba}^{(l)}(T)}_{G_{E,ba}^{(l)}(T)},$$
$$G_{E,ba}^{(l)}(T) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)T}G_{ba}^{(l)}(T) = \int_a^b \mathcal{D}r e^{\frac{i}{\hbar}S_E^{(l)}[r]}, \tag{4.39}$$
$$S_E^{(l)}[r] = \int_0^T dt\left(\frac{m}{2}\dot{r}^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - V(r) + E\right)$$

を基本形と考えればよいことになる．ここで基本形とはグリーン関数の構造上の意味であり，現実の個々の問題で (4.36) あるいは (4.38) における動径経路積分を実行することは，簡単なポテンシャルの場合でも容易ではない．

4.4 コヒーレント状態と経路積分

グリーン関数の経路積分表示は，配位空間の完全系 $\{|q\rangle\}$ でなくても，連続固有値をとる演算子の固有状態が完全系を張れば，これを用いて構成することができる．この明確な例として，消滅演算子の固有状態として導入されたコヒーレント状態 (3.28) を考える．

この状態による z-表示のグリーン関数も，完全系 $\{|q\rangle\}$ の場合と同様に時間間隔 $T_{ba} = t_b - t_a$ を等分割し，$\Delta t = \frac{T_{ba}}{N}, z_a = z_0, z_b = z_N$ 等々置いて，

$$G_{ba}^{(z)} = (z_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T_{ba}}|z_a) = \int \left(\prod_{j=1}^{N-1}\frac{d^2 z_j}{\pi}\right)\prod_{i=1}^{N}(z_i|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}|z_{i-1}) \tag{4.40}$$

の形となる．最右辺の被積分関数の指数因子は，$N \gg 1$ のとき配位空間のグリーン関数の場合と同様に Δt の 1 次近似に展開できるが，完全系が $(z|z) = 1$ と規格化されているため，Δt との積の中で $|z_i) \simeq |z_{i-1})$ と置いて，

$$\begin{aligned}
(z_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}|z_{i-1}) &\simeq (z_i|1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t|z_{i-1}) \\
&= (z_i|z_{i-1})\left[1 - \frac{i}{\hbar}\frac{(z_i|\hat{H}|z_{i-1})}{(z_i|z_{i-1})}\Delta t\right] \\
&\simeq e^{-\frac{1}{2}(z_i^* z_i + z_{i-1}^* z_{i-1}) + z_i^* z_{i-1}} e^{-\frac{i}{\hbar}(z_i|\hat{H}|z_i)\Delta t} \\
&= e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t\left\{\frac{i\hbar}{2}(z_i^*\dot{z}_i - \dot{z}_i^* z_i) - (z_i|\hat{H}|z_i)\right\}},
\end{aligned} \tag{4.41}$$

ただし，$\Delta z_i = z_i - z_{i-1}, \dot{z}_i = \frac{\Delta z_i}{\Delta t}$ である．ここで，$z_i = z(t_i)$ として

$$(z|i\hbar\frac{d}{dt}|z) = \frac{i\hbar}{2}(z^*\dot{z} - \dot{z}^* z) \tag{4.42}$$

に注意すれば，(4.41) より z を力学変数と見なす系のラグランジアンが

$$L^{(z)}(z, \dot{z}) = (z|i\hbar\frac{d}{dt} - \hat{H}|z) \tag{4.43}$$

と書ける．こうして，z-表示のグリーン関数の形は，

$$\begin{aligned}
G_{ba}^{(z)} &= \lim_{N\to\infty}\int \left(\prod_{j=1}^{N-1}\frac{d^2 z_j}{\pi}\right)\prod_{i=1}^{N}(z_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}|z_{i-1}) \\
&= \int_a^b \mathcal{D}^2 z e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt L^{(z)}(z,\dot{z})}
\end{aligned} \tag{4.44}$$

となる．ここで z 空間の経路積分の測度 $\mathcal{D}^2 z$ は，配位空間の場合と同様に，上の多重積分の極限を表現する記号である．コヒーレント状態は，調和振動子でなくても（便宜的な ω を用いて）構成することができるが，とくに調和振動子系 (3.11) の場合は，$z=\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}q+\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}}p$ を使って (4.43) を書き下すと，

$$L^{(z)}(z,\dot{z})=\frac{1}{2}(p\dot{q}-\dot{p}q)-\left(\frac{1}{2m}p^2+\frac{m\omega^2}{2}q^2+\frac{\hbar\omega}{2}\right) \tag{4.45}$$

となり，時間の完全微分と付加定数 $\frac{\hbar\omega}{2}$ を除いて，正準変数で表した調和振動子系のラグランジアンと一致する．

注意すべきは，(4.43) の構造を持つ有効ラグランジアンが (4.44) に現れた理由が，コヒーレント状態の特殊性ではなく，完全系を張る状態のノルムが 1 に規格化されていたことにあるのである．実際，$(\phi|\phi)=1$, $\int d\mu(\phi)|\phi)(\phi|=1$ 型の完全系を用いた ϕ-表示のグリーン関数から，明らかに (4.40) で $z_i\to\phi_i$, $\frac{d^2z_i}{\pi}\to d\mu(\phi_j)$ と置き換えた形が得られ，さらに $|\Delta\phi_i)=|\phi_i)-|\phi_{i-1})$ として $(\phi_i|\phi_{i-1})=e^{\log\{1-(\phi_i|\Delta\phi_i)\}}\simeq e^{\frac{i}{\hbar}\Delta t(\phi_i|i\hbar\frac{d}{dt_i}|\phi_i)}$ の形に表せば，$(\phi_i|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}|\phi_{i-1})\simeq(\phi_i|\phi_{i-1})e^{-\frac{i}{\hbar}(\phi_i|\hat{H}|\phi_i)}\simeq e^{\frac{i}{\hbar}L^{(\phi)}(\phi_i,\dot{\phi}_i)}$，ただし

$$L^{(\phi)}(\phi,\dot{\phi})=(\phi|i\hbar\frac{d}{dt}-\hat{H}|\phi) \tag{4.46}$$

が導かれるのである．

上の手順は，実は (4.46) を導くために ϕ が連続値であることすら必要ではなく，ϕ と同じく規格化の要件 $(\theta|\theta)=1$ と完全性の要件 (3.62) を満たすグラスマン変数のコヒーレント状態に対しても，適用可能である．この場合，θ-表示のグリーン関数は，z-表示の場合と同じ手順を経て，

$$\begin{aligned}G^{(\theta)}_{ba}&=(\theta_b|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T_{ba}}|\theta_a)\\&=\lim_{N\to\infty}\int\left(\prod_{j=1}^{N-1}d\bar{\theta}_jd\theta_j\right)\prod_{i=1}^{N}(\theta_i|e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t}|\theta_{i-1})\\&=\int\mathcal{D}^2\theta e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dt(\theta|i\hbar\frac{d}{dt}-\hat{H}|\theta)}\end{aligned} \tag{4.47}$$

の経路積分で表されることになる．このとき，系のハミルトニアンがフェルミ振動子のハミルトニアン (3.56) であるとすれば，経路積分から決定された有効ラグランジアンは

$$\begin{aligned}L^{(\theta)}(\theta,\dot{\theta})&=(\theta|i\hbar\frac{d}{dt}-\hat{H}|\theta)\\&=\frac{i\hbar}{2}\left(\bar{\theta}\dot{\theta}-\dot{\bar{\theta}}\theta\right)-\hbar\omega\left(\bar{\theta}\theta-\frac{1}{2}\right)\end{aligned} \tag{4.48}$$

となり，既に与えた (3.60) と時間の完全微分を除いて一致する．グラスマン変数については，スピンの自由度を通して量子力学が先に確立された．有効作用は，このようなグラスマン変数を使った離散自由度系の古典力学に，明確な基

礎を与えるものと言える．

4.5 経路積分による基本問題の再考

経路積分は，量子力学に古典力学と直結する新しい視点と手法を与えている．個々の問題の扱いでは，やさしくなる場合もあれば，高度の技術を必要とする場合もあるが，何れの場合も，量子力学を深く発展的に理解する上での役割を果している．

4.5.1 井戸型ポテンシャル再考 (II)

井戸型ポテンシャルの問題は，シュレディンガー方程式を解いて量子力学の構造を探る立場からは，自由粒子と共に取り上げられる基本問題である．しかしこの問題の経路積分による扱いは，閉じ込められた領域での経路積分の意味が明らかではないため，容易ではない．以下では，むしろシュレディンガー方程式からの知識を経路積分に焼き直す形で，この問題の理解を図る．

さて，図 2.5 の井戸型ポテンシャルに閉じ込められた粒子のエネルギー固有値 (2.92) と規格化された固有状態 (2.93) を用いると，$q_a, q_b\,(\in [0,L])$ 間の遷移の確率振幅を与えるグリーン関数は，

$$
\begin{aligned}
G_{ba} &= \langle q_b | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}T_{ba}} | q_a \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \psi_{E_n}(q_b) e^{-\frac{i}{\hbar}E_n T_{ba}} \psi_{E_n}^*(q_a) \\
&= \frac{2}{L}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{(\hbar k_n)^2}{2m}T_{ba}} \sin(k_n q_b)\sin(k_n q_a), \quad \left(k_n = \frac{\pi}{L}\right) \qquad (4.49) \\
&= \frac{1}{iL}\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{(\hbar k_n)^2}{2m}T_{ba}} \sin(k_n q_b) e^{ik_n q_a} \qquad (4.50)
\end{aligned}
$$

と書ける．明らかに，グリーン関数は境界条件 $G_{ba}|_{q_a=0,L} = G_{ba}|_{q_b=0,L} = 0$ を満たしている．ここで，ポアソンの和則

$$
\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(p - \frac{n\pi\hbar}{L}\right) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \frac{L}{\pi\hbar} e^{i\frac{2rL}{\hbar}p} \qquad (4.51)
$$

を考慮すると，G_{ba} はさらに

$$
\begin{aligned}
G_{ba} &= \frac{1}{iL}\int dp \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(p - \hbar k_n) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}T_{ba}} \sin\left(\frac{p}{\hbar}q_b\right) e^{\frac{i}{\hbar}pq_a} \\
&= \frac{1}{iL}\int dp \frac{L}{2i\pi\hbar} \sum_{r=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}T_{ba}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(2rL+q_b+q_a)p} - e^{\frac{i}{\hbar}(2rL-q_b+q_a)} \right] \\
&= \sum_{r=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T_{ba}}} \left[e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(2rL-q_b+q_a)^2}{T_{ba}}} - e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\frac{(2rL+q_b+q_a)^2}{T_{ba}}} \right] \qquad (4.52)
\end{aligned}
$$

と表される．右辺の和に現れた各項は自由粒子のグリーン関数 (4.25) であり，

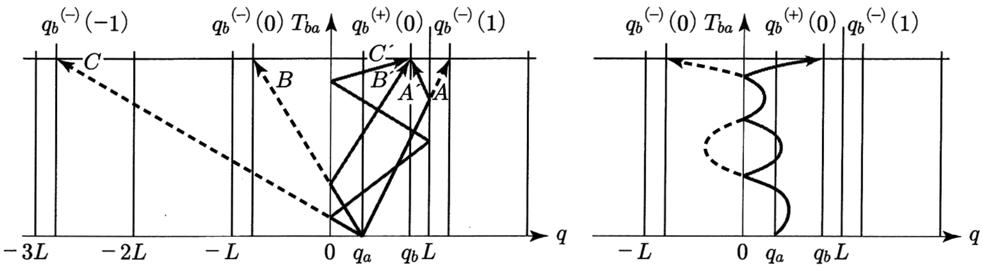


図 4.2 被覆空間での $q^{(-)}$ 経路：左図の破線で表される q_a と $q_b^{(-)}(1), q_b^{(-)}(0), q_b^{(-)}(-1)$ を結ぶ直線経路 A, B, C は，自由空間では区間 $[0, L]$ 内の実線の経路 A', B', C' と等価である．右図は，q_a と $q_b^{(-)}(0)$ を結ぶ曲線の経路（破線）と，これと等価な区間 $[0, L]$ 内の曲線（実線）である．左図・右図何れの場合も，破線と実線の効果は逆符号で打ち消し合う．

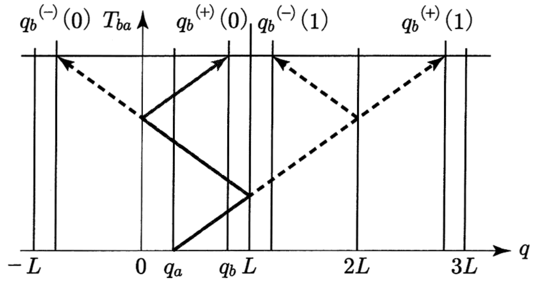


図 4.3 被覆空間での $q^{(+)}$ 経路：q_a から $q_b^{(+)}(\cdot)$ への直線経路は，偶数回壁を通過する．q_a から $q_b^{(+)}(1)$ への破線経路は，区間 $[0, L]$ の実線経路と等価であり，破線で表される逆符号の q_a から $q_b^{(-)}(0)$, $q_b^{(-)}(1)$ と等価であるため，何れの効果も打ち消される．

これに改めて記号 $\langle q_b, t_b | q_a, t_a \rangle_0$ を当て，さらに $r \to -r$ と書き換えると，G_{ba} は最終的に

$$G_{ba} = \sum_{r=-\infty}^{\infty} \left[\langle q_b^{(+)}(r), t_b | q_a, t_a \rangle_0 - \langle q_b^{(-)}(r), t_b | q_a, t_a \rangle_0 \right], \qquad (4.53)$$

$$\left(q_b^{(\pm)}(r) = 2rL \pm q_b \right)$$

となる．右辺の各項は自由空間の経路積分で表せるが，粒子の終点位置が区間 $[0, L]$ を越えており，これを解釈するためには G_{ba} を $q \equiv q + L$ の意味で拡大した被覆空間で考えなくてはならない．

図 4.2 と図 4.3 の破線は，経路を直線で代表させた場合の始点 q_a から終点 $q_b^{(\pm)}(\cdot)$ への経路であり，これらは区間 $[0, L]$ で折り返しのある実線経路と等価である．折り返された経路の中，$q_b^{(-)}(\cdot)$ からの寄与と $q_b^{(+)}(\cdot)$ からの寄与は逆符号で互いに打消し合う．この構造は，図 4.2 の右図で示されるように，始点と終点が曲線で結ばれる場合でも同様であり，(4.52) の和には q_a から q_b への折り返しの無い経路の寄与のみが残る．

注意すべきは，q_a と $q_b^{(\pm)}(\cdot)$ を結んだ直線が通過する壁の数の偶数・奇数は，終点位置が $2L$ ずつ移動するため，両端を曲線経路で結んだ場合でも変わらず，経路に固有の数となることである．そこで，これを明示するために，改めて

$$q_b(n) = \begin{cases} q_b^{(-)}(2r = n+1) = (n+1)L - q_b, & (n \in \mathrm{odd})\,, \\ q_b^{(+)}(2r = n) = nL + q_b, & (n \in \mathrm{even}) \end{cases} \tag{4.54}$$

と定義し，$q_b^{(\pm)}(\cdot)$ の違いを n の偶奇性に対応させれば，井戸型ポテンシャルに対応するグリーン関数は，経路積分

$$G_{ba} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \int_{q_a}^{q_b(n)} \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \frac{m}{2}\dot{q}^2} \tag{4.55}$$

で表されることになる．

練習問題 4.5.1

ポアソンの和則を確かめよ．

解答 $f(p) \equiv \displaystyle\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(p - \frac{n\pi\hbar}{L}\right)$ は周期 $\frac{\pi\hbar}{L}$ の周期関数であるから，フーリエ級数に展開して $f(p) = \displaystyle\sum_{r=-\infty}^{\infty} f_r \sqrt{\frac{L}{\pi\hbar}} e^{i\frac{2Lr}{\hbar}}$ と書ける．このとき，展開係数は

$$f_r = \int_{-\frac{\pi\hbar}{2L}}^{\frac{\pi\hbar}{2L}} dp \sqrt{\frac{L}{\pi\hbar}} e^{-i\frac{2Lr}{\hbar}} f(p) = \sqrt{\frac{L}{\pi\hbar}}$$

と求まる．得られた f_r を $f(p)$ の展開係数に戻すと，示すべき和則となる．□

4.5.2 調和振動子再考 (II)

調和振動子系は正確に解が求まり，しかも応用範囲の広い力学系である．経路積分の枠組みにおいては，自由粒子の場合と同様に，グリーン関数の主な構造が古典解により決定されるという特徴を示す．これを見るために，調和振動子系の作用 (2.94) から導かれる運動方程式を書き下すと

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q} = -m\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega^2\right) q = 0 \tag{4.56}$$

である．従って，$t = t_a$ を初期時刻とする古典解の一般形は，

$$q_{\mathrm{c}}(t) = A\sin(\omega T_a) + B\cos(\omega T_a),\ (T_a = t - t_a) \tag{4.57}$$

と書ける．ここで，まず初期条件 $q_{\mathrm{c}}(t_a) = q_a$ を置くと，$B = q_a$ と決まる．次いで，終点位置の条件 $q_{\mathrm{c}}(t_b) = q_b = A\sin(\omega T_{ba}) + q_a\cos(\omega T_{ba})$, $(T_{ba} = t_b - t_a)$ から，$A = \{q_b - q_a\cos(\omega T_{ba})\}/\sin(\omega T_{ba})$ となる．従って，

$$q_{\mathrm{c}}(t) = \frac{q_b - q_a\cos(\omega T_{ba})}{\sin(\omega T_{ba})}\sin(\omega T_a) + q_a\cos(\omega T_a)\,, \tag{4.58}$$

$$\dot{q}_{\mathrm{c}}(t)=\omega\left[\frac{q_b-q_a\cos(\omega T_{ba})}{\sin(\omega T_{ba})}\cos(\omega T_a)-q_a\sin(\omega T_a)\right] \tag{4.59}$$

等である．一方，経路積分による調和振動子のグリーン関数は，

$$G_{ba}=\int_a^b \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar}S[q]},\quad \left(S[q]=\frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}dt\left(\dot{q}^2-\omega^2q^2\right)\right) \tag{4.60}$$

と表される．このとき，積分経路から $q(t)=q_{\mathrm{c}}(t)+q'(t)$, $(q'(t_a)=q'(t_b)=0)$ により古典軌道を分離すると，$\dot{q}_{\mathrm{c}}\dot{q}'=\frac{d}{dt}(\dot{q}_{\mathrm{c}}q')-\ddot{q}_{\mathrm{c}}q'=\frac{d}{dt}(\dot{q}_{\mathrm{c}}q')+\omega^2q_{\mathrm{c}}q'$ に注意して，

$$\begin{aligned} S[q_{\mathrm{c}}+q'] &= \frac{m}{2}\int_{t_a}^{t_b}dt\left\{(\dot{q}_{\mathrm{c}}+\dot{q}')^2-\omega^2(q_{\mathrm{c}}+q')^2\right\} \\ &= S[q_{\mathrm{c}}]+S[q'] \end{aligned} \tag{4.61}$$

が得られる．ここで右辺の第 1 項は，$\dot{q}_{\mathrm{c}}^2=\frac{d}{dt}(\dot{q}_{\mathrm{c}}q_{\mathrm{c}})+\omega^2q_{\mathrm{c}}^2$ を考慮して (4.58), (4.59) を用いると，

$$S[q_{\mathrm{c}}]=\frac{m}{2}\left[\dot{q}_{\mathrm{c}}q_{\mathrm{c}}\right]_{t_a}^{t_b}=\frac{m}{2}\left\{\dot{q}_{\mathrm{c}}(t_b)q_b-\dot{q}_{\mathrm{c}}(t_a)q_a\right\} \tag{4.62}$$

$$=\frac{m}{2}\frac{(q_b^2+q_a^2)\cos(\omega T_{ba})-2q_bq_a}{\sin(\omega T_{ba})} \tag{4.63}$$

となる．こうして，(4.60) の経路積分は，$\mathcal{D}q=\mathcal{D}q'$ に注意して

$$G_{ba}=N(T_{ba})e^{\frac{i}{\hbar}S[q_{\mathrm{c}}]},\quad \left(N(T_{ba})=\int\mathcal{D}q'e^{\frac{i}{\hbar}S[q']}\right) \tag{4.64}$$

の形に得られる．規格化因子 $N(T_{ba})$ は，自由粒子の場合と同様にグリーン関数の結合則 (4.24) から決めることもできるが，直接 q' の汎関数積分を実行して決定することもできる．

このために，条件 $q'(t)|_{t_a,t_b}=0$ を考慮して $q'(t)$ を正規直交完全系 $s_n(t)=\sqrt{\frac{2}{T_{ba}}}\sin\left(\frac{n\pi(t-t_a)}{T_{ba}}\right)$, $(n=1,2,\cdots)$ を用いてフーリエ級数 $q'(t)=\sum_n a_ns_n(t)$ に展開し，$\mathcal{D}q'=N\prod_{i=1}^{\infty}da_n$ と考えると

$$\begin{aligned} N(T_{ba}) &= N\prod_{n=1}^{\infty}\int da_n e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2}\left\{\left(\frac{n\pi}{T_{ab}}\right)^2-\omega^2\right\}a_n^2}=N'\left[\prod_{n=1}^{\infty}\left\{\left(\frac{n\pi}{T_{ba}}\right)^2-\omega^2\right\}\right]^{-\frac{1}{2}} \\ &= N''\left[\prod_{n=1}^{\infty}\left\{1-\left(\frac{\omega T_{ba}}{n\pi}\right)^2\right\}\right]^{-\frac{1}{2}}=N''\sqrt{\frac{\omega T_{ba}}{\sin(\omega T_{ba})}}. \end{aligned} \tag{4.65}$$

ここで N'' は，考えている系が $\omega\to 0$ で自由粒子系になることから $N(T_{ba})\to N''=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar T_{ba}}}$, $(\omega\to 0)$ と決まり，最終的に (3.40) で得られた結果

$$G_{ba}(T_{ba})=\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i\sin(\omega T_{ba})}}\,e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega T_{ba})}\left\{(q_b^2+q_a^2)\cos(\omega T_{ba})-2q_bq_a\right\}} \tag{4.66}$$

が再確認される．

上に得られたグリーン関数の形は，ポテンシャルが $V(r)=\frac{m\omega}{2}r^2$ の 3 次元等方調和振動子の場合でも同様で，座標変数の直交成分を経路積分することにより（以下，$T_{ba}=T$ と略記して）

$$G_{ba}(T)=\left(\frac{m\omega}{2\pi i\hbar\sin(\omega T)}\right)^{\frac{3}{2}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2\sin(\omega T)}\left\{\left(\boldsymbol{r}_b^2+\boldsymbol{r}_a^2\right)\cos(\omega T)-2\boldsymbol{r}_b\cdot\boldsymbol{r}_a\right\}} \tag{4.67}$$

となることは明らかである．一方，考えている系は中心対称なポテンシャルの下にある粒子であり，座標変数を極座標 $\left(r,\hat{\boldsymbol{\Omega}}(\theta,\varphi)\right)$ に書き換えることにより，(4.67) を経路積分に基づくグリーン関数の形 (4.37) に表すことが可能である．これを実行するために，(4.67) の指数関数の一部をルジャンドル関数 $P_n(z)$ と変形ベッセル関数 $I_\nu(z)$ を用いて

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{\sin(\omega T)}\boldsymbol{r}_b\cdot\boldsymbol{r}_a}=\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{\frac{\pi}{2}\frac{i\hbar\sin(\omega T)}{m\omega r_b r_a}}\times(2l+1)P_l(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b\cdot\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega r_b r_a}{i\hbar\sin(\omega T)}\right) \tag{4.68}$$

と書き換え*3)，さらに球面調和関数の性質

$$P_l(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b\cdot\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{\mu=-l}^{l}Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b)Y_{l\mu}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a) \tag{4.69}$$

を使うと，グリーン関数 (4.67) を

$$G_{ba}(T)=\frac{1}{r_a r_b}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{\mu=-l}^{l}Y_{l\mu}(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_b)Y_{l\mu}^*(\hat{\boldsymbol{\Omega}}_a)\times\frac{m\omega\sqrt{r_b r_a}}{i\hbar\sin(\omega T)}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2}(r_b^2+r_a^2)\cot(\omega T)}I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega r_b r_a}{i\hbar\sin(\omega T)}\right) \tag{4.70}$$

の形に表すことができる．これと (4.37) を比較することにより，角運動量 l の部分空間で動径変数の経路積分を実行したことに相当する

$$\begin{aligned}G_{ba}^{(l)}(T)&=\int_a^b\mathcal{D}r e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^T dt\left(\frac{m}{2}\dot{r}^2-\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}-\frac{m\omega^2}{2}r^2\right)}\\&=\frac{m\omega\sqrt{r_b r_a}}{i\hbar\sin(\omega T)}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2}(r_b^2+r_a^2)\cot(\omega T)}I_{l+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega r_b r_a}{i\hbar\sin(\omega T)}\right)\end{aligned} \tag{4.71}$$

---

*3)　この形は，ベッセル関数の加法定理の一つ，

$$e^{z\cos\theta}-\sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)\sqrt{\frac{\pi}{2z}}I_{n+\frac{1}{2}}(z)P_n(\cos\theta)$$

であり，物理におけるレーリーの平面波展開の方程式（[37, Sec.11]）と同等である．また，変形ベッセル関数 $I_n(x)$ は，第 1 種のベッセル関数 $J_n(x)$ と，$I_n(x)=i^{-n}J_n(ix)$ で結ばれる．

の表式を得る．

4.5.3 水素型原子再考 (II)

水素型原子は，ポテンシャルが $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ で与えられる代表的な球対称ポテンシャルの系であるが，この系のシュレディンガー方程式のグリーン関数を (4.36) あるいは (4.37) を基に動径変数の経路積分を実行して求めることは難問の一つであり，ようやく 1979 年になって，ドゥルークライナーによりこの問題に対する一つの解が見出された．この場合の要となる手法は，動径変数で記述される水素型原子の問題を変数変換により調和振動子系の問題に帰着させ，この系の知識を使ってグリーン関数を導くもので，ドゥルークライナーの場合は 4 次元の等方調和振動子系への等価変換を見出したのである．その後，異なる立場での解法が見出されたが，何らかの意味で調和振動子系の経路積分に帰着させて考える立場は同一である．

このような変換の一つを知るために*4)，$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$, $(t_a, t_b) = (0, T)$ とした上で，(4.39) で定義されたグリーン関数 $G^{(l)}_{E,ba}(E)$ に対する，必ずしも等分割ではない時間分割の下での極限表示

$$G^{(l)}_{E,ba}(T) = \lim_{N\to\infty} \prod_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t_i}} \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty dr_k e^{\frac{i}{\hbar} S^{(l)}_{N,E}[r]}, \tag{4.72}$$

ただし，

$$S^{(l)}_{N,E}[r] = \sum_{i=1}^{N} \Delta t_i \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{r_i - r_{i-1}}{\Delta t_i} \right)^2 - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr_i^2} + \frac{Ze^2}{r_i} + E \right\} \tag{4.73}$$

を考える．ここで，$\rho = \sqrt{r}$ として，時間変数と空間変数を混合する変換

$$\Delta t_i = 4\bar{\rho}_i^2 \Delta\tau_i, \quad (\bar{\rho}_i = \sqrt{\rho_i \rho_{i-1}}) \tag{4.74}$$

を実行する．このとき，

$$\prod_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta t_i}} \prod_{k=1}^{N-1} dr_k = \frac{1}{\sqrt{4\rho_N \rho_0}} \prod_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta\tau_i}} \prod_{k=1}^{N-1} d\rho_k \tag{4.75}$$

および $\Delta r_i^2 = (\rho_i^2 - \rho_{i-1}^2)^2 = \Delta\rho_i^2(\Delta\rho_i + 2\rho_{i-1})^2 = \Delta\rho_i^2(\Delta\rho_i^2 + 4\Delta\bar{\rho}_i^2)$ に注意すると，(4.72) のグリーン関数は

$$G^{(l)}_{E,ba}(T) = \frac{1}{\sqrt{4\rho_b \rho_a}} \lim_{N\to\infty} \prod_{i=1}^{N} \sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar \Delta\tau_i}} \prod_{k=1}^{N-1} \int_0^\infty d\rho_k e^{\frac{i}{\hbar} \tilde{S}^{(l)}_{N,E}[\rho]}, \tag{4.76}$$

---

*4) 文献 [27], [28] は，このような研究の開拓者の書であり，多くの方法を知ることができる．この節の構成は，動径変数の経路積分の基礎を与え，それを応用した [30] の考え方に従った．

ただし

$$\tilde{S}^{(l)}_{N,E}[\rho] = \sum_{i=1}^{N} \Delta\tau_i \left\{ \frac{m}{2}\left(\frac{\Delta\rho_i}{\Delta\tau_i}\right)^2 + \frac{m}{2}\frac{\Delta\rho_i^4}{4\bar{\rho}_i\Delta\tau_i^2} \right.$$
$$\left. -\frac{4\hbar^2 l(l+1)}{2m\bar{\rho}_i^2} + 4Ze^2 + 4E\bar{\rho}_i^2 \right\} \qquad (4.77)$$

の形に表される．次に，(4.77) を (4.76) に代入して $N \to \infty$, $(\Delta\tau_i \to 0)$ の極限をとる．その際，$\bar{\rho}_i \to \rho_i$, $\Delta\rho_i/\Delta\tau_i \to \dot{\rho}_i$ は明らかであるが，(4.77) の $\Delta\rho^4$ 項は単純に高次項として 0 にはできない．実際，短い時間間隔の遷移振幅 $\sqrt{m/(2\pi\hbar\Delta\tau)}e^{\frac{i}{\hbar}\Delta\tau\frac{m}{2}\left(\frac{\Delta\rho}{\Delta\tau}\right)^2}$ による $\Delta\rho$ の 4 次の相関は，$\langle\frac{\Delta\rho^4}{\Delta\tau}\rangle = 3\left(\frac{i\hbar}{m}\right)^2$ $(\neq 0)$ である．そこで，$\tilde{S}^{(l)}_{N,E}$ の右辺第 2 項にこの値を代入した形*5) が，$N \to \infty$ での作用を決定すると考えると，(4.77) は

$$\tilde{S}^{(l)}_{N,E}[\rho] = \sum_{i=1}^{N} \Delta\tau_i \left\{ \frac{m}{2}\dot{\rho}_i^2 - \frac{\hbar^2\lambda(\lambda+1)}{2m\rho_i^2} + 4Ze^2 - \frac{m}{2}\omega^2\rho_i^2 \right\} \qquad (4.78)$$

$$\left(\lambda \equiv 2l + \frac{1}{2},\ \omega = \sqrt{-\frac{8E}{m}} \right) \qquad (4.79)$$

と書き改められる．この結果は，付加定数 $4Ze^2$ を除けば動径変数で表した 3 次元調和振動子の作用に他ならず，(4.76) の極限を動径変数の経路積分の測度 $\mathcal{D}\rho = \lim_{N\to\infty}\prod_{i=1}^{N}\left(\frac{m}{2\pi i\hbar\Delta\tau_i}\right)^{\frac{1}{2}}\prod_{i=1}^{N-1}d\rho_i$ および遷移の時間間隔 $\tau = \lim_{N\to\infty}\sum_{i=1}^{N}\frac{\Delta t_i}{4\rho_i\rho_{i-1}}$ を用いて

$$G^{(l)}_{E,ba}(T) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(4Ze^2)\tau}}{\sqrt{4\rho_b\rho_a}}\int_a^b \mathcal{D}\rho e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^\tau d\tau\left\{\frac{m}{2}\dot{\rho}_i^2 - \frac{\hbar^2\lambda(\lambda+1)}{2m\rho_i^2} - \frac{m}{2}\omega^2\rho_i^2\right\}} \qquad (4.80)$$

と表すことができる．右辺の経路積分には，調和振動子で得られている結果 (4.71) を適用することができ，最終的に

$$G^{(l)}_{E,ba}(T) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(4Ze^2)\tau}}{2} \times \frac{m\omega}{i\hbar\sin(\omega\tau)}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m\omega}{2}(\rho_b^2+\rho_a^2)\cot(\omega\tau)}$$
$$\times I_{\lambda+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega\rho_b\rho_a}{i\hbar\sin(\omega\tau)}\right) \qquad (4.81)$$

の表式を得る．

次に，(4.81) から (4.39) に従って，角運動量 l の部分空間における時間に依存しないグリーン関数 $R^{(l)}_{ba}(E)$ を，$dT = 4\rho_b\rho_a d\tau$ として，

*5) 別の言い方をすると，$a \gg b(>0)$ に対し

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 - bx^4} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-ax^2 - \frac{3b}{4a^2}} + O(a^{-3})$$

を適用する形．

$$R_{ba}^{(l)}(E) = \frac{i}{\hbar}\int_0^\infty (4\rho_b\rho_a)d\tau G_{E,ba}^{(l)}(T)$$
$$= \int_0^\infty d\tau \frac{2\rho_b\rho_a m\omega}{\hbar^2\sin(\omega\tau)} e^{\frac{i}{\hbar}\left\{(4Ze^2)\tau + \frac{m\omega}{2}(\rho_b^2+\rho_a^2)\cot(\omega\tau)\right\}}$$
$$\times I_{\lambda+\frac{1}{2}}\left(\frac{m\omega\rho_b\rho_a}{i\hbar\sin(\omega\tau)}\right) \tag{4.82}$$

の形に表す．系のエネルギー E は ω の中に含まれており，$R_{ba}^{(l)}(E)$ の E の関数としての特異点がエネルギー固有値を決定する．この値を調べるために，(4.82) の積分で $\omega\tau = iq$, $x_a = -\frac{m\omega}{\hbar}\rho_a^2$, $x_b = -\frac{m\omega}{\hbar}\rho_b^2$ および $p = \frac{Ze^2}{\hbar\omega}$ と解析接続をし，$\rho_b > \rho_a$ としてホイタッカー関数 $W_{\kappa,\mu}(z), M_{\kappa,\mu}(z)$ の逆ラプラス変換の性質[38]

$$\int_0^\infty \frac{dq}{\sinh(q)} e^{-2pq} e^{-\frac{1}{2}(x_a+x_b)\coth(q)} I_{2\nu}\left(\frac{\sqrt{x_a}\sqrt{x_b}}{\sinh(q)}\right)$$
$$= \frac{\Gamma\left(p+\nu+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{x_a x_b}\,\Gamma(2\nu+1)} M_{-p,\nu}(x_b) W_{-p,\nu}(x_a) \tag{4.83}$$

を利用する（$\rho_a > \rho_b$ の場合は，a, b を入れ替える）．これにより，$2\nu = \lambda(\lambda+1)$ あるいは $\nu = l + \frac{1}{2}$ として，

$$R_{ba}^{(l)}(E) = \frac{2m\rho_b\rho_a}{\hbar^2}\frac{\Gamma\left(p+\nu+\frac{1}{2}\right)}{\sqrt{x_a x_b}\,\Gamma(2\nu+1)} M_{-p,\nu}(x_b) W_{-p,\nu}(x_a)$$
$$= \frac{2}{\hbar\omega(2l+1)!} M_{-p,\nu}(x_b) W_{-p,\nu}(x_a) \tag{4.84}$$

の表式に至る．従って，グリーン関数 $R_{ba}^{(l)}(E)$ における E の（孤立）特異点は，p を通してガンマ関数の特異点の位置 $p + l + 1 = -n_r$, $(n_r = 0, 1, 2, \cdots)$ に現れる*6)．これを，$p = \frac{2Ze^2}{\hbar\sqrt{-8E/m}}$ を使って E の値に戻すと，

$$E = -\frac{mZe^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \quad (n = l+1, l+2, \cdots) \tag{4.85}$$

が水素型原子のエネルギー固有値ということになる．得られた結果は，シュレディンガー方程式を解いて得られた結果，行列力学（因数分解法）を使って解いた結果と一致するが，かなりの手順を要し，かつ特殊関数の性質を縦横に使った導出法となっている．量子論，場の量子論の様々な問題で目覚ましい力を発揮する経路積分の手法も，量子力学の発端でありシュレディンガーにより

*6) ホイタッカー関数の定義は，

$$M_{\kappa,\mu}(z) = z^{\mu+\frac{1}{2}} e^{-\frac{z}{2}} \sum_{n=0}^\infty \frac{\Gamma(2\mu+1)\Gamma(\mu-\kappa+n+\frac{1}{2})}{\Gamma(2\mu+n+1)\Gamma(\mu-\kappa+\frac{1}{2})}\frac{z^n}{n!},$$
$$W_{\kappa,\mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2}-\mu-\kappa)} M_{\kappa,\mu}(z) + (\mu \leftrightarrow -\mu)$$

である．(4.84) では $\kappa = -p$, $\mu = \nu = l + \frac{1}{2}$ であるから，この定義に含まれるガンマ関数の特異点も $p + l + 1 = -n_r$, $(n_r = 0, 1, 2, \cdots)$ の位置に現れる．

やすやすと解かれた水素型原子の問題を，難問とするのである．

練習問題 4.5.2

(4.82) で用いた，$d\tau = \frac{dT}{4\rho_b\rho_a}$ の変換は，分割された微小時間間隔に対しては (4.74) の定義そのものであるが，積分された T, τ に関しては自明ではない．この形が，どのような意味の $dT, d\tau$ において成立するか調べよ．

解答 $T^{(N)} = \sum_{i=1}^{N} \Delta\tau_i (4\rho_i\rho_{i-1})$ は，(ρ_N, ρ_0) を通して両端の関数になっている．いま，連続極限の汎関数微分に対応する ρ_i による微分を $\frac{\delta}{\delta\rho_i} = \frac{1}{\Delta\tau_i}\frac{\partial}{\partial\rho_i}$ と書くと，$\tilde{\rho} = \frac{1}{2}(\rho_N + \rho_0)$ を固定して $\bar{\rho} = \rho_N - \rho_0$ を変化させた汎関数微分による $T^{(N)}$ の変化は，

$$\frac{\delta T^{(N)}}{\delta\bar{\rho}} = \frac{1}{2}\left(\frac{\delta T^{(N)}}{\delta\rho_N} - \frac{\delta T^{(N)}}{\delta\rho_0}\right) = 2(\rho_{N-1} - \rho_1)$$

となる．同様に，$\tau^{(N)} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\Delta t_i}{4\rho_i\rho_{i-1}}$ に対して $\frac{\delta\tau^{(N)}}{\delta\bar{\rho}} = \frac{\rho_{N-1}-\rho_1}{8\rho_N\rho_0}$ が得られ，$\bar{\rho}$ の変動に伴う T, τ の変化の比が，

$$\frac{\delta\tau}{\delta T} \equiv \lim_{N\to\infty} \frac{\frac{\delta\tau^{(N)}}{\delta\bar{\rho}}}{\frac{\delta T^{(N)}}{\delta\bar{\rho}}} = \frac{1}{4\rho_b\rho_a}, \quad ((\rho_0, \rho_N) = (\rho_a, \rho_b)),$$

と求まる．この意味での $\frac{\delta\tau}{\delta T}$ は，微小区間では自然に (4.74) に帰着する．□

4.6 虚数時間の経路積分と統計力学

経路積分は，遷移の確率振幅を求める実用的で有効な手段であるが，そこに現れる時間を虚軸に解析接続した理論形式は，物理的に意味のある，統計力学とも密接に関係する構造となっている．

まず，一般的なポテンシャル問題において経路積分を近似的に実行する，**WKB 近似**の手法から考える．シュレディンガー方程式の立場では，この近似は（1 次元）ポテンシャル $V(q)$ の下でのエネルギー E の固有状態を $\psi_E(q) = e^{\frac{i}{\hbar}S(q)}$, ($S$：アイコナール) と表した上で，$S(q) \simeq S^{(0)}(q) + \frac{\hbar}{i}S^{(1)}(q)$ と $\hbar$ 展開の 1 次項まで決定する近似である．この結果，

$$\psi_E^{\mathrm{WKB}}(q) \simeq \frac{N}{\sqrt{p(q)}} e^{\pm\frac{i}{\hbar}\int^q dq' p(q')}, \quad \left(p(q) = \sqrt{2m(E - V(q))}\right) \tag{4.86}$$

の近似解が得られる．この近似は**準古典近似**とも呼ばれ，経路積分の立場では古典軌道の周りの 2 次の揺らぎまでを取り入れた経路積分に対応する．これを見るために，系の作用を $S[q] = \int dt \left(\frac{m}{2}\dot{q}^2 - V(q)\right)$ とし，運動方程式

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} \equiv -\left(m\frac{d^2 q(t)}{dt^2} + V'(q(t))\right) = 0 \tag{4.87}$$

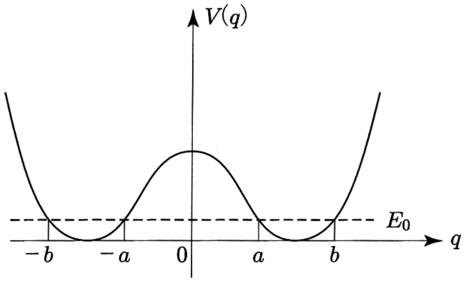


図 4.4 二重井戸型ポテンシャル.

と，境界条件 $q_c(t_a) = q_a$, $q_c(t_b) = q_b$ を満たす古典解（軌道）を $q_c(t)$ とする．このとき，積分経路 $q(t)$ を古典解とそれからのずれ $\bar{q}(t)$ に分離し

$$q(t) = q_c(t) + \bar{q}(t), \ (\bar{q}(t_a) = \bar{q}(t_b) = 0, \ \mathcal{D}q = \mathcal{D}\bar{q}\,) \tag{4.88}$$

と表し，$S[q] = S[q_c + \bar{q}]$ を $\bar{q}(t)$ の 2 次まで展開すると，

$$S[q] \simeq S[q_c] + \frac{1}{2}\int dt \int dt' \bar{q}(t) \left\{ \frac{\delta^2 S[q]}{\delta q(t) \delta q(t')} \right\}_c \bar{q}(t'), \tag{4.89}$$

ただし，

$$\frac{\delta^2 S[q]}{\delta q(t)\delta q(t')} = -\left(m\frac{d^2}{dt^2} + V''(q(t)) \right) \delta(t - t') \tag{4.90}$$

である．従って，グリーン関数 G_{ba} は

$$\begin{aligned} G_{ba} &= \int_a^b \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar}S[q]} \simeq e^{\frac{i}{\hbar}S[q_c]} \int \mathcal{D}\bar{q} e^{\frac{i}{2\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt \int_{t_a}^{t_b} dt' \bar{q}(t) \left(\frac{\delta^2 S[q]}{\delta q(t)\delta q(t')} \right)_c \bar{q}(t')} \\ &= \frac{N}{\sqrt{\det\left(\frac{1}{\hbar} \frac{\delta^2 S[q]}{\delta q(t)\delta q(t')} \right)_c}} e^{\frac{i}{\hbar}S[q_c]} \end{aligned} \tag{4.91}$$

と近似される*7)．古典軌道に沿って保存されるエネルギーを E とすると，$m\dot{q}_c = \pm\sqrt{2m(E - V(q_c))}$ から $S[q_c] = \int_{t_a}^{t_b} dt(p_c\dot{q}_c - E) = -ET_{ba} + \int_{q_a}^{q_b} dq p_c$ となり，保存系のハミルトン主関数の構造 (A.46) とから，(4.91) が (4.86) に対応することが分かる．

さて，WKB 近似の位相 $S_E[q_c] = \pm\int_a^b dq p(q)$ を図 4.4 内にあるエネルギー E_0 の粒子の場合で考えると，$E_0 < V(q)$ の区間では運動量が $p(q) = i\bar{p}(q) = i\sqrt{2m(V(q) - E_0)}$ と純虚数となり，$\psi_E^{\mathrm{WKB}} \propto e^{\pm\int^q dq' \bar{p}(q')}$ となる．この位相

*7) $\det(\cdots)$ の記号は，正の固有値 $a_n, (n = 1, \cdots, N)$ を持つ有限行列 $\boldsymbol{A} = [A_{ij}], (i, j = 1, 2, \cdots, N)$ の積分

$$\int d^N x e^{-\frac{1}{2}\sum_{i,j} x_i A_{ij} x_j} = \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\prod_n a_n}} = \frac{(2\pi)^{\frac{N}{2}}}{\sqrt{\det \boldsymbol{A}}}$$

を無限次元の行列に形式的に用いたもので，固有値の積が正しい意味をなす．

は，経路積分の立場からは，時間の解析接続 $t=-i\tau$ の下で得られる古典解から評価される．実際，この解析接続の下で，

$$S[q]=\int_{t_a}^{t_b}dt\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{dt}\right)^2-V(q)\right\}$$
$$=i\int_{\tau_a}^{\tau_b}d\tau\left\{\frac{m}{2}\left(\frac{dq}{d\tau}\right)^2+V(q)\right\}\equiv i\bar{S}[q] \tag{4.92}$$

であり，$\bar{S}$ の古典解を用いて**トンネル効果**として知られる区間 $E_0<V(q)$ での評価 $G_{ba}\propto e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[q_c]}$ が導かれる．

一方，トンネル効果とは別に，虚数時間に基づく経路積分の手法は，任意の力学系で**統計力学の分配関数**を求めるための，有効な方法ともなっている．虚数時間への解析接続は，遷移の確率密度で言えば $\langle q_b|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|q_a\rangle=\langle q_b|e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}\tau}|q_a\rangle$ であり，k_{B} をボルツマン定数，T を絶対温度として $\tau=\hbar\beta$, $(\beta=1/k_{\mathrm{B}}T)$ とおくと，統計力学の正準集団における分配関数が，

$$Z(\beta)=\mathrm{tr}\left(e^{-\beta\hat{H}}\right)=\int dq_a\langle q_a|e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}\tau}|q_a\rangle \tag{4.93}$$
$$=\int dq_a\int_a^a\mathcal{D}qe^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[q]},\quad\left(\bar{S}[q]=\int_0^{\hbar\beta}d\tau\left\{\frac{m}{2}\dot{q}^2+V(q)\right\}\right),$$

$(\dot{q}=\frac{dq}{d\tau})$ の意味で経路積分に置き換えられる．この形から，$\hat{H}$ の固有状態の完全系を $\{\phi_n(q)=\langle q|n\rangle;\ \hat{H}|n\rangle=E_n|n\rangle\}$ として

$$\rho(q_a)\equiv\frac{1}{Z(\beta)}\int_a^a\mathcal{D}qe^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[q]}=\frac{\langle q_a|e^{-\frac{1}{\hbar}\hat{H}\tau}|q_a\rangle}{Z(\beta)}$$
$$=\sum_n|\phi_n(q_a)|^2P_n(\beta),\ \left(P_n(\beta)=e^{-\beta E_n}/Z(\beta)\right) \tag{4.94}$$

と置いたものは，温度 T の下でのエネルギー分布を取り入れた粒子の位置の確率密度に他ならない．

正準集団の期待値を虚数時間（有限温度）の下での経路積分に置き換える場合，$q(\tau)$ の時間的周期性に注意しなくてはならない．これは，ハイゼンベルク形式の演算子が $\hat{q}(\tau)=\hat{q}(t=-i\tau)=e^{\frac{\tau}{\hbar}\hat{H}}\hat{q}e^{-\frac{\tau}{\hbar}\hat{H}}$ と書けることに注意して，

$$\langle f(\hat{q}(\tau))\rangle_\beta=\frac{1}{Z(\beta)}\mathrm{tr}\left\{f(\hat{q}(\tau))e^{-\beta\hat{H}}\right\}=\frac{1}{Z(\beta)}\mathrm{tr}\left\{e^{-\beta\hat{H}}f(\hat{q}(\tau+\hbar\beta))\right\}$$
$$=\langle f(\hat{q}(\tau+\hbar\beta))\rangle_\beta \tag{4.95}$$

となることによる．従って，分配関数を表す経路積分も，周期的境界条件 $q(\tau)=q(\tau+\hbar\beta)$ を満たす力学変数にわたる汎関数積分として定義される．そこで，必要に応じてフーリエ級数展開

$$q(\tau)=\sum_n q_n\frac{1}{\sqrt{\hbar\beta}}e^{i\frac{2\pi n}{\hbar\beta}\tau} \tag{4.96}$$

を行い，$\mathcal{D}q = N(\prod_n dq_n)$, $\bar{S}_\beta[\{q_n\}] = \int_0^{\hbar\beta} d\tau \left(\frac{m}{2}\dot{q}(\tau)^2 - V(q(\tau))\right)$ 等を考えれば，分配関数は

$$
\begin{aligned}
Z(\beta) &= \int dq_a \int_{\tau=0}^{\tau=\hbar\beta} \mathcal{D}q\delta(q_a - q(0))e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}_\beta[q]} \\
&= N\int \left(\prod_n dq_n\right) e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}_\beta[\{q_n\}]} \qquad (4.97)
\end{aligned}
$$

と表される．例として（1 次元）調和振動子を考えれば，虚数時間の作用は

$$
\begin{aligned}
\bar{S}[q] &= -\frac{m}{2}\int_0^{\hbar\beta} d\tau q(\tau)\left(\frac{d^2}{d\tau^2} - \omega^2\right) q(\tau) \\
&= \frac{m}{2}\sum_n q_{-n}\left\{\left(\frac{2\pi n}{\hbar\beta}\right)^2 + \omega^2\right\} q_n,\ (\,q_{-n} = q_n^*\,) \qquad (4.98)
\end{aligned}
$$

であり，この形を (4.97) に代入してガウス積分を実行すると，

$$
\begin{aligned}
Z(\beta) &= \frac{N}{\prod_n \frac{m}{2\hbar}\left\{\left(\frac{2\pi n}{\hbar\beta}\right)^2 + \omega^2\right\}} = \frac{N'}{\omega\prod_{n=1}^{\infty}\left\{1 + \left(\frac{\beta\hbar\omega}{2\pi n}\right)^2\right\}} \\
&= \frac{N'}{\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \qquad (4.99)
\end{aligned}
$$

となる．ここで，N' は ω, β を含む定数であるが，調和振動子の基底状態のエネルギーが $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ であることから漸近形 $Z(\beta) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta E_n} \sim e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}$, $(\beta \to \infty)$ が要求され，$N' = \frac{1}{2}$ と決まる．こうして，温度 $T = 1/k_{\mathrm{B}}\beta$ にある調和振動子の分配関数が

$$
Z(\beta) = \frac{1}{2\sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)} \qquad (4.100)
$$

と求まる．この分配関数は，温度 T で熱平衡状態にある系の平均エネルギー

$$
\langle E\rangle_\beta = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z(\beta) = \frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \qquad (4.101)
$$

を導く．右辺第 2 項は，プランクの黒体輻射の理論に現れる角振動数 ω の光子 1 個当たりの平均エネルギーに他ならず，光が（無限個の）調和振動子集団の性格を持つことに対応する．

練習問題 4.6.1

WKB 近似の下で，(4.86) が得られることを確かめよ．

解答 シュレディンガー方程式 $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dq^2} + V\right)\psi_E = E\psi_E$ に $\psi_E = e^{\frac{i}{\hbar}S}$ を代入すると，$\psi_E'' = \left\{\frac{i}{\hbar}S'' - \frac{1}{\hbar^2}S'^2\right\}\psi_E$ から

$$
-\hbar^2\left\{\frac{i}{\hbar}S''(q) - \frac{1}{\hbar^2}S'^2(q)\right\} = 2m(E - V(q)) = p(q)^2.
$$

さらに上式で $S \simeq S^{(0)} + \frac{\hbar}{i}S^{(1)}$ と置いて $\hbar$ の次数が同じ項を等値すると，$S^{(0)\prime 2} = 2m(E-V)$, $S^{(1)\prime} = -\frac{1}{2}\frac{S^{(0)\prime\prime}}{S^{(0)\prime}} = -\frac{1}{2}\left\{\log S^{(0)\prime}\right\}'$ が得られ，最終的に $S^{(0)} = \pm p$, $S^{(1)} = \log p^{-\frac{1}{2}} + \text{const.}$ と定まり (4.86) に至る．□

4.7 経路積分と母関数

経路積分 (4.20) は，シュレディンガー方程式に基づく配位空間の遷移の確率振幅を与えたが，これを N-点関数と呼ばれるグリーン関数の異なる形式から見直すことができる．N-点関数は，量子場の相互作用と結び付く基本量であるが，経路積分はこれを与える基礎的な手法ともなっている．

4.7.1 *N*-点関数と母関数

そこでまず，時間の分割 $t_a < t_1 < \cdots < t_{N-1} < t_N < t_b$ の下で，時間の大きい順に左から右に並べたハイゼンベルク表示の位置の演算子 $\hat{q}(t_i) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_i}\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_i} = \int dq|q,t_i\rangle q\langle q,t_i|$ の T-積を

$$T\left[\prod_{i=1}^{N}\hat{q}(t_i)\right] = \hat{q}(t_N)\hat{q}(t_{N-1})\cdots\hat{q}(t_2)\hat{q}(t_1) \tag{4.102}$$

で定義する．このとき，$G_{i,i-1} = \langle q_i, t_i|q_{i-1}, t_{i-1}\rangle$ として

$$\begin{aligned}\langle q_b, t_b|T\left[\prod_{i=1}^{N}\hat{q}(t_i)\right]|q_a, t_a\rangle &= \int\left(\prod_{j=1}^{N}dq_j\right)G_{b,N}\left(\prod_{i=2}^{N}q_iG_{i,i-1}\right)G_{1,a}\\ &= \int_a^b\mathcal{D}q\left(\prod_{i=1}^{N}q_i\right)e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b}dtL}\end{aligned} \tag{4.103}$$

と書ける．一方，ハミルトニアンの固有状態の完全系を $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, $(E_0 < E_1 < E_2 < \cdots)$ として，

$$\begin{aligned}e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t_a}|q_a, t_a\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t_a}\sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t_a}|q_a\rangle\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle\langle n|q_a\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E_n-E_0)t_a}\\ &\sim |0\rangle\langle 0|q_a\rangle,\ (\mathrm{Im}\,t_a \sim \infty).\end{aligned} \tag{4.104}$$

同様に，

$$e^{\frac{i}{\hbar}E_0t_b}\langle q_b, t_b| \sim \langle q_b|0\rangle\langle 0|,\ (\mathrm{Im}\,t_b \sim -\infty) \tag{4.105}$$

である．従って，

$$\langle 0|T\left[\prod_{i=1}^{N}\hat{q}(t_i)\right]|0\rangle = \lim_{\substack{\mathrm{Im}\,t_a\to\infty\\ \mathrm{Im}\,t_b\to-\infty}}\frac{\langle q_b, t_b|\prod_{i=1}^{N}\hat{q}(t_i)|q_a, t_a\rangle}{e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t_b}\langle q_b|0\rangle\langle 0|q_a\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_0t_a}}$$

$$= \lim_{\substack{\mathrm{Im}\, t_a \to \infty \\ \mathrm{Im}\, t_b \to -\infty}} \frac{\langle q_b, t_b | \prod_{i=1}^N \hat{q}(t_i) | q_a, t_a \rangle}{\langle q_b, t_b | 0 \rangle \langle 0 | q_a, t_a \rangle}$$

$$= N \int_a^b \mathcal{D}q \left(\prod_{i=1}^N q_i \right) e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_a}^{t_b} dt L} \tag{4.106}$$

となる．ここで，N は $\langle q_b, t_b|0\rangle\langle 0|q_a, t_a\rangle$ の分母を付けた上での極限を表現する規格化因子であるが，最後の結果は a, b に依存しない．そこで，N を汎関数積分の測度に含め，$\mathrm{Re}\, t_a \ll t_1, \mathrm{Re}\, t_b \gg t_N$ として a, b の記号も省略して作用 $S[q] = \int dt L(q, \dot{q})$ を使った単純な表式にすると，N-点関数の表式

$$\langle 0| T \left[\prod_{i=1}^N \hat{q}(t_i) \right] |0\rangle = \int \mathcal{D}q \left(\prod_{i=1}^N q_i \right) e^{\frac{i}{\hbar} S[q]}, \ (\, q_i = q(t_i)\,) \tag{4.107}$$

に至る．ここで，汎関数積分の測度は，左辺の形から

$$\langle 0|0\rangle = \int \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} S[q]} = 1 \tag{4.108}$$

で規格化されなくてはならない．上の手順により，量子力学では $|0\rangle$ は基底状態を表すが，無限自由度の場の量子論ではこれを**真空状態**に置き換えて考えることにより，N-点関数は同じ構造となる．

さて，T-積の中では，演算子の並び順は最後の結果に影響しないので，$J(t)$ を c-数の任意関数として，

$$T \left[\prod_{i=1}^N \hat{q}(t_i) \right] = \left(\prod_{i=1}^N \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J(t_i)} \right) T e^{\frac{i}{\hbar} \langle J \hat{q} \rangle} \Big|_{J=0}, \ \left(\langle J \hat{q} \rangle = \int dt J(t) \hat{q}(t) \right) \tag{4.109}$$

と書くことができる．これより，**母関数**と呼ばれる $J(t)$ の汎関数

$$Z[J] = \langle 0| T e^{\frac{i}{\hbar} \langle J \hat{q} \rangle} |0\rangle = \int \mathcal{D}q e^{\frac{i}{\hbar} (S[q] + \langle J q \rangle)}, \tag{4.110}$$

$$(\, Z[0] = \langle 0|0\rangle = 1\,)$$

を定義すれば，N-点関数に対し

$$\langle 0| T[\hat{q}(t_1) \cdots \hat{q}(t_N)] |0\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J(t_1)} \cdots \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J(t_N)} Z[J] \Big|_{J=0} \tag{4.111}$$

の表式が得られることになる．

4.7.2 2-点関数

2-点関数は，経路積分の G_{ba} と直接に結び付く．この意味を知るために，古典系の作用 $S[q]$ が力学変数の 2 次形式であり，

$$\delta S[q] = -\frac{1}{2} \int dt q \hat{K} \left(\frac{d^2}{dt^2} \right) q, \ \left(\frac{\delta S[q]}{\delta q(t)} = -\hat{K} q(t) \right) \tag{4.112}$$

と書ける場合を考える．自由粒子の場合は，$\hat{K}=m\frac{d^2}{dt^2}$ であり，調和振動子の場合は $\hat{K}=m\left(\frac{d^2}{dt^2}+\omega^2\right)$ である．このとき，母関数 (4.110) を基に計算される 2-点関数は，必要に応じて汎関数積分の正則因子 $\epsilon=+0$ を導入し，

$$\langle 0|T\hat{q}(t_2)\hat{q}(t_1)|0\rangle=\int\mathcal{D}q q(t_2)q(t_1)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\int dt q\left(\hat{K}-i\epsilon\right)q} \tag{4.113}$$

と表される．この両辺に $\hat{K}_2=\hat{K}\left(\frac{d^2}{dt_2^2}\right)$ を作用させて

$$\begin{aligned}\hat{K}_2\langle 0|T\hat{q}(t_2)\hat{q}(t_1)|0\rangle&=-\frac{\hbar}{i}\int\mathcal{D}q q(t_1)\frac{\delta}{\delta q(t_2)}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{1}{2}\int dt q\left(\hat{K}-i\epsilon\right)q}\\&=\frac{\hbar}{i}\int\mathcal{D}q\frac{\delta q(t_1)}{\delta q(t_2)}e^{\frac{i}{\hbar}S[q]}=-i\hbar\delta(t_2-t_1),\end{aligned} \tag{4.114}$$

ただし，$\frac{\delta q(t_1)}{\delta q(t_2)}=\delta(t_2-t_1)$ を用いた．従って，この場合の 2-点関数は $\hat{K}$ の逆演算子であり，上の例では

$$\langle 0|T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|0\rangle=-i\hbar\hat{K}_2^{-1}\delta(t_2-t_1)=\frac{\hbar}{2m\omega}e^{-i\omega|t_2-t_1|} \tag{4.115}$$

と求まる．この結果は，古典的調和振動子の作用 $S[q]$ が導く運動方程式のグリーン関数であり，調和振動子系のシュレディンガー方程式に対するグリーン関数 (4.66) とは異なる．2-点関数をシュレディンガー方程式のグリーン関数と結び付けるためには，シュレディンガー方程式を導く古典的作用，即ちシュレディンガー波動場の作用

$$S[\psi,\psi^*]=\int dt\int dV\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)\psi \tag{4.116}$$

から議論を組み立てればよい．ここで，$\hat{H}$ は古典系を（第 1）量子化したハミルトニアン演算子で，調和振動子であれば $\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2$ である．このとき，(4.113) に対応する 2-点関数は，

$$\langle 0|T\hat{\psi}_2\hat{\psi}_1^\dagger|0\rangle=\int\mathcal{D}\psi\mathcal{D}\psi^*(\psi_2\psi_1^*)e^{\frac{i}{\hbar}\langle\psi^*(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H})\psi\rangle} \tag{4.117}$$

に対応する．ここで，$\psi_i=\psi(\boldsymbol{r}_i,t_i),(i=1,2)$, $\langle\cdots\rangle=\int dt\int dV(\cdots)$ 等の省略記号を用いた．(4.117) は，(4.113) と同様に $\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}-\hat{H}\right)_2\langle 0|T\hat{\psi}_2\hat{\psi}_1^\dagger|0\rangle=i\hbar\delta_{21}$ を満たし，(4.6) との比較から，$\langle 0|T\hat{\psi}_2\hat{\psi}_1^\dagger|0\rangle=G_{21}$ であることが分かる．こうして，1 粒子波動関数から求まる遷移の確率振幅と，波動場の作用に基づく 2-点関数が結び付く．

練習問題 4.7.1

作用 $S[q]$ から定義される (4.110) の母関数 $Z[J]$ が，シュウィンガー–ダイソン方程式

$$\left[\frac{\delta S}{\delta q}\left(q=\frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta J}\right)+J\right]Z[J]=0$$

を満たすことを確かめよ．

解答　母関数を定義する汎関数積分が収束していれば，被積分関数は無限遠方で 0 になっているので，恒等式を変形して

$$0 = \int \mathcal{D}q \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta q} e^{\frac{i}{\hbar}(S[q]+\langle Jq \rangle)} = \int \mathcal{D}q \left(\frac{\delta S}{\delta q} + J \right) e^{\frac{i}{\hbar}(S[q]+\langle Jq \rangle)}$$
$$= \left[S\left(q = \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J} \right) + J \right] Z[J] .$$

ただし最後の等式では，$f(q)e^{\frac{i}{\hbar}\langle Jq \rangle} = f\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta J}\right) e^{\frac{i}{\hbar}\langle Jq \rangle}$ を使って，$S[q]$ の汎関数微分を汎関数積分の外に取り出した．□

練習問題 4.7.2

シュウィンガー–ダイソン方程式を解いて，（自由）シュレディンガー場の母関数を求めよ．

解答　シュレディンガー場は複素場のため，母関数は複素関数 J を用いた

$$Z[J, J^*] = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* e^{\frac{i}{\hbar}(S[\psi,\psi^*]+\langle J\psi + j^*\psi * \rangle)}, \quad \left(\langle \cdots \rangle = \int dt \int dV (\cdots) \right),$$
$$\left(S[\psi, \psi^*] = \int dt \int dV \psi^* \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi \right)$$

と考える．このとき，$\frac{\delta S}{\delta \psi^*} = \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \psi$ から，シュウィンガー–ダイソン方程式は $\left[\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right) \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J} + J^* \right] Z[J, J^*] = 0$ あるいは

$$\frac{\delta}{\delta J} Z = -\frac{i}{\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} + i\epsilon \right)^{-1} J^* Z$$

である．これは，J に関する 1 階汎関数微分方程式で，条件 $Z[0,0] = \int \mathcal{D}\psi \mathcal{D}\psi^* e^{\frac{i}{\hbar}S} = \langle 0|0 \rangle = 1$ の下で解けて，

$$Z[J, J^*] = e^{-\frac{i}{\hbar}\langle J \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} + i\epsilon \right)^{-1} J^* \rangle}.$$

この形から，$\frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J_2} \frac{\hbar}{i} \frac{\delta}{\delta J_1^*} Z \Big|_{J=J^*=0} = i\hbar \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} + i\epsilon \right)_1^{-1} \delta_{12}$ 等も導かれる．
□

4.8 場の量子論への応用

経路積分は，グリーン関数を摂動論的に求める際や，拘束条件のある系に適用する場合にも，見通しの良い手段となっている．

4.8.1 摂動展開の考え方

力学変数 q で記述される系の作用が，$S[q] = S_0[q] + S_{\mathrm{int}}[q]$ の形に分離し，S_0 が経路積分の実行可能な主要項で，$S_{\mathrm{int}}[q]$ が摂動項であるとする．このと

き，グリーン関数の母関数は

$$\begin{aligned}Z[J] &= \int \mathcal{D}q\, e^{\frac{i}{\hbar}(S_0[q]+S_{\rm int}[q]+\langle Jq\rangle)} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}S_{\rm int}[\frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta J}]} \underbrace{\int \mathcal{D}q\, e^{\frac{i}{\hbar}(S_0[q]+\langle Jq\rangle)}}_{Z_0[J]} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{i}{\hbar}S_{\rm int}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\delta}{\delta J}\right]\right)^n Z_0[J] \end{aligned} \tag{4.118}$$

が，摂動展開の基本形となる．

例として，作用が

$$S[\phi] = -\frac{1}{2}\int d^4x \left\{\phi(x)\left(\partial^2+m^2\right)\phi(x) + g\rho(x)\phi(x)\right\} \tag{4.119}$$

で与えられる，実スカラー場を考える*8)．ここで $\rho(x)$ は，結合定数 g でスカラー場と相互作用を行う外場であり，$S_{\rm int}[\phi] = g\int d^4x\rho(x)\phi(x)$ の意味になる．このとき，自由場の母関数

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}\phi\, e^{-\frac{i}{2}\langle\phi(\partial^2+m^2)\phi+J\phi\rangle} \tag{4.120}$$

は，シュウィンガー–ダイソン方程式

$$\left[-\left(\partial^2+m^2\right)\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J}+J\right]Z_0[J]=0 \tag{4.121}$$

から容易に求まり，$Z_0[J] = N(\phi)e^{\frac{i}{2}\langle J(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}J\rangle}$ と決定される．従って，相互作用を取り入れた分配関数は

$$\begin{aligned}Z[J] &= e^{i\langle g\rho\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J}\rangle}N(\phi)e^{\frac{i}{2}\langle J(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}J\rangle} \\ &= N(\phi)e^{\frac{i}{2}\langle(J+g\rho)(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}(J+g\rho)\rangle}\end{aligned} \tag{4.122}$$

となる．ここで，$N(\phi)$ は，$Z[0]=1$ から $N(\phi) = e^{-\frac{i}{2}g^2\langle\rho(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}\rho\rangle}$ と決まり，最終的に摂動展開を全て足し上げた形が，

$$Z[J] = e^{iW[J]} = e^{i\left[\frac{1}{2}\langle J(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}J\rangle + g\langle J(\partial^2+m^2-i\epsilon)^{-1}\rho\rangle\right]} \tag{4.123}$$

と求まる．この形は，$Z[J]$ に対するシュウィンガー–ダイソン方程式

$$\left[\left\{-\left(\partial^2+m^2\right)\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J}+g\rho\right\}+J\right]Z[J]=0 \tag{4.124}$$

を条件 $Z[0]=1$ の下で解いても得られ，原理的には任意の問題で，$Z_0[J]$ に摂動効果を取り入れて正しい $Z[J]$ が得られることになる．

さて，$W[J] = -i\log Z[J](\to 0\,(J\to 0))$ の役割に注目してみる．例えば

*8) この章の相対論的な場の記述では，煩雑さを避けるために $\hbar = c = 1$ の自然単位系を選択する．

2-点関数が

$$\langle 0|T\hat{\phi}_1\hat{\phi}_2|0\rangle = \frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_1}\frac{1}{i}\frac{\delta}{\delta J_2}Z[J]\bigg|_{J=0}, \quad (J_i = J(x_i) \text{ etc.}) \tag{4.125}$$

$$= \frac{1}{i}\left(\frac{\delta^2 W}{\delta J_1 \delta J_2}\right)_{J=0} + \left(\frac{\delta W}{\delta J_1}\right)_{J=0}\left(\frac{\delta W}{\delta J_2}\right)_{J=0} \tag{4.126}$$

から分かるように，$Z[J]$ が与える N-点関数は可約な構造を持ち，$W[J]$ から求まる規約な N-点関数 $G_c^{(N)}(x_1,\cdots,x_N) = \left(\frac{1}{i}\right)^N \frac{\delta}{\delta J_1}\cdots\frac{\delta}{\delta J_N}W[J]\,|_{J=0}$ の組み合わせとなる．また，$W[J]$ から定義される

$$\bar{\phi} \equiv \frac{\delta W[J]}{\delta J} = -i\frac{\frac{\delta Z[J]}{\delta J}}{Z[J]} = \frac{\int \mathcal{D}\phi\,\phi e^{i(S[\phi]+\langle J\phi\rangle)}}{\int \mathcal{D}\phi\, e^{i(S[\phi]+\langle J\phi\rangle)}} \tag{4.127}$$

は，外場 J を付加した作用で定義の下での ϕ の期待値の意味を持ち，量子効果の取り入れられた変数になる．そこで，ルジャンドル変換

$$\Gamma[\bar{\phi}] = W[J] - \langle J\bar{\phi}\rangle \tag{4.128}$$

を行うと，$\frac{\delta\Gamma}{\delta J} = \frac{\delta W}{\delta J} - \bar{\phi} = 0$ から，$\Gamma[\bar{\phi}]$ は $\bar{\phi}$ を独立変数とする汎関数になり，$\bar{\phi}$ の運動方程式

$$\frac{\delta\Gamma[\bar{\phi}]}{\delta\bar{\phi}} = -J \tag{4.129}$$

を導く．この形は，外場 J の効果の付加された作用 $S_J[\phi] = S[\phi] + \langle J\phi\rangle$ が与える運動方程式 $\frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi} = -J$ と同じ構造であり，$\Gamma[\bar{\phi}]$ は量子効果を取り入れた $\bar{\phi}$ に対する**有効作用**の性格を持つ．作用が (4.119) で与えられたスカラー場の例では，

$$\bar{\phi} = \frac{\delta W[J]}{\delta J} = (\partial^2 + m^2)^{-1}(J + g\rho) \tag{4.130}$$

であり，これから直ちに

$$\Gamma[\bar{\phi}] = -\left\langle \frac{1}{2}\bar{\phi}(\partial^2 + m^2)\bar{\phi} + g\rho\bar{\phi}\right\rangle + \frac{1}{2}g^2\langle\rho(\partial^2 + m^2 - i\epsilon)^{-1}\rho\rangle \tag{4.131}$$

に至る．$\Gamma[\bar{\phi}]$ の右辺第 1 項と第 2 項は $S_J[\bar{\phi}]$ であり，第 3 項が量子効果として付加された項となっている．

練習問題 4.8.1

(4.131) に量子効果として現れた $\frac{1}{2}g^2\langle\rho(\partial^2 + m^2 - i\epsilon)^{-1}\rho\rangle$ を，静的な場の源 $\rho(\boldsymbol{r},t) = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1) - \delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_2)$ の場合に評価せよ．

解答 $(\partial^2 + m^2)^{-1}$ は平行移動の下で不変であるため，量子効果は $\boldsymbol{r}_i, (i = 1, 2)$ の差の関数であり，また源が静的であるため ∂_0 も寄与しない．従って，同一点の源からの無意味な無限大の c-数を捨てると，$\delta_i = \delta^{(3)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i)$ として

$$\frac{1}{2}g^2\langle\rho(\partial^2 + m^2 - i\epsilon)^{-1}\rho\rangle \simeq -g^2\langle\delta_1(-\nabla^2 + m^2)^{-1}\delta_2\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&= -g^2 T \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}}{\boldsymbol{k}^2+m^2} \\
&= g^2 T \int_0^\infty \frac{dk}{(2\pi)^2} \frac{k^2}{k^2+m^2} \frac{e^{ikR}-e^{-ikR}}{ikR} \ , \quad (R = |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|) \\
&= \frac{g^2 T}{(2\pi)^2 iR} \int_{-\infty}^\infty dk \frac{k}{(k+im)(k-im)} e^{ikR} = \frac{g^2 T}{4\pi R} e^{-mR} .
\end{aligned}
$$

ただし，第 2 の等式では時間の積分を $T = \int_0^T dt$ として切断し，第 3 の等式では $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{R} = kR\cos\theta$, $d^k = 2\pi \sin\theta dk d\theta$ として角度の積分を行った．また，第 4 の等式では，被積分関数が複素 k 面の上方で収束するため，積分路を遠方で上方に周回させて $k = im$ の特異点を取り入れた．

得られた量子効果は，Γ を作用と考えると，源が持つ外部パラメーター $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ に依存する有効ポテンシャル $V_{\text{eff}} = -\frac{g^2}{4\pi R} e^{-mR}$ を付け加えたことになる．□

4.8.2　経路積分と拘束条件

ハミルトニアン $H(q,p)$, $q = (q_1, \cdots, q_n)$, $p = (p_1, \cdots, p_n)$ で記述される系において，拘束条件 $\phi_i(q,p) = 0$, $(i = 1, 2, \cdots, m < n)$ が付随し，下記のポアソン括弧の代数を満たす（第 1 類の拘束条件の）場合を考える．

$$
\{\phi_i, \phi_j\} = \sum_k C_{ij}{}^k \phi_k \ , \quad \{H, \phi_i\} = \sum_j C_i{}^j \phi_j \, . \tag{4.132}
$$

この代数により，$\phi_i = 0$ を満たす正準変数の部分空間は時間的に不変であり，系の時間発展を表すハミルトニアンには (A.64) の任意性が現れる．この任意性を取り除いて独立な正準変数で系の時間発展を記述するために，

$$
\{\chi_i, \chi_j\} = 0 \ , \quad \det \|\{\chi, \phi_j\}\| \neq 0 \tag{4.133}
$$

を満たす付加的な拘束条件 $\chi_i = 0$, $(i = 1, 2, \cdots, m)$ を要請する．このような拘束条件 $\phi_i = 0$ はゲージ理論における**ゲージ条件**であり，$\chi_i = 0$ は**ゲージ固定条件**に対応する．このとき (4.133) の第 1 式は，正準変換 $q \to q' = (\tilde{q}, q^*) = (\tilde{q}_1, \cdots, \tilde{q}_m, q^*_{m+1}, \cdots, q^*_n)$ および $p \to p' = (\tilde{p}, p^*) = (\tilde{p}_1, \cdots, \tilde{p}_m, p^*_{m+1}, \cdots, p^*_n)$ の下で，ゲージ固定条件が $\chi'_i = \tilde{q}_i - c_i$，$(i = 1, \cdots, m;\ c_i：定数)$ の形に書けることを保証する．一方 (4.133) の第 2 式は，ゲージ条件が $\phi'_i = 0$ の根 $\tilde{p}_i = f_i(\tilde{q}, q^*, p^*)$, $(i = 1, 2, \cdots, m)$ の近傍で，$\phi'_i \simeq \sum_j \frac{\partial \phi'_i}{\partial \tilde{p}_j}(\tilde{p}_j - f_j)$ と書けることを意味し，結局

$$
1 = \int d^m\tilde{q} d^m\tilde{p} \left| \det \left(\frac{\partial \phi'_i}{\partial \tilde{p}_j} \right) \right| \delta^{(m)}(\chi') \delta^{(m)}(\phi') \tag{4.134}
$$

の恒等式を得ることになる．

さて，正準変換後の相空間 (q', p') のハミルトニアン $H'(\tilde{q}, q^*, \tilde{p}, p^*)$ から，$\tilde{q}_i = c_i$, $\tilde{p}_i = f_i(c_i, q^*, p^*)$ と置いて決まる部分空間 (q^*, p^*) のハミルトニアン

を $H^*(q^*,p^*)$ とする．このとき，(q^*,p^*), $H^*(q^*,p^*)$ で記述される部分空間に拘束条件はなく，通常の正準量子化を実行してシュレディンガー方程式のグリーン関数を経路積分の形

$$G_{ba} = \langle q_b^* | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}^* T_{ba}} | q_a^* \rangle \ , \quad (T_{ba} = t_b - t_a) \tag{4.135}$$

$$= \int_a^b \mathcal{D}q^* \int \mathcal{D}p^* e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\{p^*\cdot\dot{q}^* - H^*(q^*,p^*)\}} \tag{4.136}$$

に表すことができる．ここで $\det\left(\frac{\partial \phi'_i}{\partial \tilde{p}_j}\right) = \det\left[\{\chi'_i, \phi'_j\}\right]$ に注意し，恒等式 (4.134) を汎関数積分の形で表してグリーン関数の経路積分に適用すると，

$$G_{ba} = \int_a^b \mathcal{D}q^* \int \mathcal{D}p^* \left\{ \int \mathcal{D}\tilde{q}\mathcal{D}\tilde{p} \left|\det\left[\{\chi'_i, \phi'_j\}\right]\right| \delta(\chi')\delta(\phi') \right\} \times e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\{p^*\cdot\dot{q}^* - H^*(q^*,p^*)\}}$$

$$= \int_a^b \mathcal{D}q\mathcal{D}p \left|\det\left[\{\chi_i, \phi_j\}\right]\right| \delta(\chi)\delta(\phi) e^{\frac{i}{\hbar}\int_{t_a}^{t_b} dt\{p\cdot\dot{q} - H(q,p)\}} \tag{4.137}$$

が得られる．ただし，最後の等式に現れるデルタ関数は $\delta(\phi) = \prod_{q,p} \delta^{(m)}(\phi(q,p))$ 等の意味であり，またポアソン括弧が正準変換の不変量であることを考慮して，G_{ba} の表式を最初の相空間 (q,p) 上の諸量に戻して表している．

(4.137) は，1970 年にファデーエフにより与えられた，第 1 類の拘束条件を持つ力学系に対するグリーン関数の経路積分形式であるが，同様の手法はゲージ場の量子化にも適用することができる*9)．第 2 章で取り上げた，電磁場の場合を考えると，電磁場のラグランジアン密度 $\mathcal{L}_A = -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ はゲージ変換 $A_\mu \to A_\mu^f = A_\mu + \partial_\mu f$ の下で不変 $(\mathcal{L}_A = \mathcal{L}_{A^f})$ である．一方，ゲージ場 A_μ^f の経路積分には，ゲージ変換に基づくゲージ場の変動経路も含まれ，その経路での積分は変動領域の大きさに比例することになり，発散する．そこで，A_μ^f ごとに f を一つだけ選ぶゲージ固定拘束条件として，例えば

$$F(A^f) = (\partial\cdot A^f) - \chi = (\partial\cdot A) + \partial^2 f - \chi = 0 \tag{4.138}$$

を置く（図 4.5）．ここで χ は任意の実関数で，F の関数形もゲージ固定条件の役割を果す一例である．さて，ゲージ固定条件を経路積分の測度に取り込むために，(4.134) に対応する恒等式

$$1 = \left|\det\left(\frac{\delta F}{\delta f}\right)\right| \int \mathcal{D}f \delta\left(F(A^f)\right) \tag{4.139}$$

を利用する．ここで行列式は，$\frac{\delta F(x)}{\delta f(x')} = \partial_x^2 \delta^{(4)}(x-x') = \langle x|\partial^2|x'\rangle$ から，グラスマン変数のスカラー場（ゴースト場）$(C,\bar{C})$ を用いて

*9) ファデーエフは，ゲージ理論での経路積分の手法を提唱した後，その手法を拘束条件のある力学系に適用した．

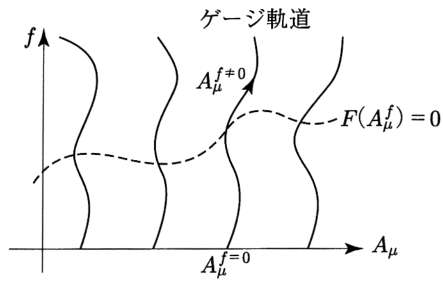


図 4.5 f により生じるゲージ軌道 (orbits): ゲージ変換 $A \to A^f$ で生じるゲージ軌道上で $\mathcal{L}_A$ は縮退し，この軌道に沿った経路積分は発散する．ゲージ固定条件 $F(A^f)=0$ で軌道上の一点を拾い出すことにより，経路積分は収束する．(非可換ゲージ場の理論では，F が多価関数になる問題が生じ得る.)

$$\det\left(\frac{\delta F}{\delta f}\right) = N\int \mathcal{D}C\mathcal{D}\bar{C}e^{-\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\partial_\mu\bar{C}\partial^\mu C} \tag{4.140}$$

となり，$\int \mathcal{D}f\delta\left(F(A^f)\right)$ は χ に依らない．そこで，$1=\int \mathcal{D}\chi e^{\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\left(-\frac{1}{2\alpha}\chi^2\right)}$ で規格化されたガウス積分を使って，(4.139) の $\mathcal{D}f$ 積分を

$$\begin{aligned}\int \mathcal{D}f\delta\left(F(A^f)\right) &= \int\mathcal{D}\chi\int\mathcal{D}f\delta\left(F(A^f)\right)e^{\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\left(-\frac{1}{2\alpha}\chi^2\right)}\\ &= \int\mathcal{D}fe^{\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\left(-\frac{1}{2\alpha}(\partial\cdot A^f)^2\right)}\end{aligned} \tag{4.141}$$

と書いてよい．こうして，J^μ を外場とする電磁場の分配関数として

$$\begin{aligned}Z[J] &= \int\mathcal{D}A\left|\det\left(\frac{\delta F}{\delta f}\right)\right|\int\mathcal{D}f\delta\left(F(A^f)\right)e^{\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\left(\mathcal{L}_A - A^f\cdot J\right)}\\ &= N'\int\mathcal{D}A\int\mathcal{D}C\mathcal{D}\bar{C}e^{\frac{i}{\hbar}\int d^4\Omega\left(\mathcal{L}_A-\frac{1}{2\alpha}(\partial\cdot A)^2-\partial_\mu\bar{C}\partial^\mu C - A\cdot J\right)}\end{aligned} \tag{4.142}$$

が得られる．ただし最後の等式では，$\mathcal{D}A$ がゲージ不変量であることに注意して $A_\mu^f \to A_\mu$ とゲージ変換し，最終的に $N' = N\int\mathcal{D}f$ を無意味な（無限大の）定数として，経路積分から取り除いた．

最終的に得られた電磁場のラグランジアン密度の形から，第 2 章の練習問題 2.7.4 で理由を明らかにせず導入されたゴースト場が，ゲージ固定条件の表現構造を通して自然に表れる場であることが分かる．電磁場は，$U(1)$ 群のゲージ対称性に基づく最も単純なゲージ理論の例であるが，上記の経路積分によるゲージ理論の扱いは，非可換群に基づくゲージ理論の場合にも適用可能である．ただし，そのようなゲージ場の理論では (4.139) の行列式がゲージ場の関数となり，$(C,\bar{C})$ はゲージ場と相互作用を行う場となる．

練習問題 4.8.2

$M=[M_{ij}]\,(i,j=1,2,\cdots,N)$ を $N\times N$ 行列，$\bar{\theta}_i$, $\theta_i\,(i=1,2,\cdots,N)$ をグ

ラスマン変数 ($\{\bar{\theta}_i, \bar{\theta}_j\} = \{\theta_i, \theta_j\} = \{\bar{\theta}_i, \theta_j\} = 0$) とするとき，

$$\int \prod_{i=1}^{N} (d\theta_i d\bar{\theta}_i) e^{a\theta^T \cdot M \cdot \theta} = a^N \det(M)$$

を確かめよ．

解答 グラスマン変数では，$\int d\theta_i(\cdots) = \frac{\partial}{\partial \theta_i}(\cdots)$ であり，上の積分は指数関数を展開した N 次の項のみが残る（N 次以下は N 階微分で消え，N 次以上は同じグラスマン変数が 2 度以上現れて 0 になる）．また，グラスマン変数対は任意の変数と可換であるから，

$$\begin{aligned}
\int \prod_{i=1}^{N} (d\theta_i d\bar{\theta}_i) e^{a\theta^T \cdot M \cdot \theta} &= \frac{a^N}{N!} \prod_{i=1}^{N} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_i} \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_i} \right) (\bar{\theta} \cdot M \cdot \theta)^N \\
&= \frac{a^N}{N!} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_N} \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_N} \right) \cdots \left(\frac{\partial}{\partial \theta_1} \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_1} \right) \\
&\quad \times (\bar{\theta}_{i_1} \theta_{j_1}) \cdots (\bar{\theta}_{i_N} \theta_{j_N}) M_{i_1 j_1} \cdots M_{i_N j_N} \\
&= \frac{a^N}{N!} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_N} \cdots \frac{\partial}{\partial \theta_1} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_N} \cdots \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}_1} \right) \\
&\quad \times (\bar{\theta}_{i_1} \cdots \bar{\theta}_{i_N})(\theta_{j_1} \cdots \theta_{j_N}) M_{i_1 j_1} \cdots M_{i_N j_N}
\end{aligned}$$

を得る．ただし最後の等式では，$\left(\frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \bar{\theta}}\right)$ の並べ替えと，$(\bar{\theta}, \theta)$ の並べ替えの互換の回数が同じであり，グラスマン数の入れ替えによる符号が打ち消し合うことを使った．また，i, j に関する和の記号は省略された．ここで

$$\bar{\theta}_{i_1} \cdots \bar{\theta}_{i_N} = \epsilon_{i_1 \cdots i_N} \bar{\theta}_1 \cdots \bar{\theta}_N, \quad \theta_{j_1} \cdots \theta_{j_N} = \epsilon_{j_1 \cdots j_N} \theta_1 \cdots \theta_N$$

により，完全反対称な符号因子 $\epsilon_{i_1 \cdots i_N}$ を導入すると，行列式の定義より

$$\begin{aligned}
\int \prod_{i=1}^{N} (d\theta_i d\bar{\theta}_i) e^{a\theta^T \cdot M \cdot \theta} &= \frac{a^N}{N!} \epsilon_{i_1 \cdots i_N} \epsilon_{j_1 \cdots j_N} M_{i_1 j_1} \cdots M_{i_N j_N} \\
&= a^N \det M
\end{aligned}$$

を得る．ただし，最後の形はグラスマン変数の積分の順に依存し，例えば積分測度を $d^N\theta d^N\bar{\theta} \equiv (d\theta_N \cdots d\theta_1)(d\bar{\theta}_N \cdots d\bar{\theta}_1)$ と定義すれば，$a^N \to (-1)^{\frac{N(N-1)}{2}} a^N$ と修正される．(4.140) は，上のグラスマン変数による行列式の表示を，$\theta_i, \bar{\theta}_i \to C(x), \bar{C}(x)$ と場の変数に拡張して表したものである．□

第 5 章
量子力学と確率過程量子化

量子力学と確率過程は類似した構造があり，量子力学の諸問題を扱う上で役に立つ考え方を与えることも多い．この章では，量子力学そのものの解釈を狙ったネルソンの試みと，経路積分の解析接続形とも言えるパリジ–ウーの確率過程量子化法を紹介し，幾つかの応用例について述べる．

5.1 古典力学のハミルトン–ヤコビ理論と確率過程量子化

1966 年，E. ネルソンは量子力学がシュレディンガー方程式に基礎を置かずとも，古典力学とブラウン運動を組み合わせた確率過程の考え方から，導かれる可能性を示した．以下，簡単のために空間の次元は 1 次元とする．ネルソンはまず，ポテンシャル $V(x)$ の下でブラウン運動を行う質量 m の粒子の位置 $x(t)$ と速度 $v(t)$ を連立する，確率微分方程式

$$dx(t) = v(t)dt, \tag{5.1}$$

$$dv(t) = -\beta v(t)dt + K(x(t))dt + dB(t) \tag{5.2}$$

を考察した．ここで，$K(x) = -\frac{1}{m}\frac{\partial V(x)}{\partial x}$ は外力，$m\beta v$ は粘性抵抗，また $dB(t) = \sigma_0 dW(t)\,,(\sigma_0$： 定数) はウィーナー過程 $dW(t)$ が表すランダムな変動効果である（付録 B)．(5.2) は，形式的な微分で白色ノイズ $\frac{dW}{dt} = \eta$ を導入すれば，外力 K，粘性抵抗 $-m\beta v$，およびランダムな外力 $m\sigma_0\eta$ の下でのランジュバン方程式に他ならない．

さて，白色ノイズ η に対する期待値を $\langle\cdots\rangle$ で表すと，(B.1) より，

$$\langle dB(t)\rangle = 0\,, \quad \langle dB(t)dB(t)\rangle = \sigma_0^2 dt\,, \tag{5.3}$$

が導かれる．上の期待値は，時刻 t より過去の確率変数を固定した上で，時間間隔 dt の間で与えられており，

$$Dv(t) \equiv \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t} \{v(t+\Delta t) - v(t)\} \right\rangle \tag{5.4}$$

$$= -\beta v(t) + K(x(t)) \tag{5.5}$$

は，時間の前向き微分で定義された加速度の意味を持つ．定義により，ウィーナー過程は時間の向きに対して対称ではないため，時刻 t 以後の確率変数を固定する期待値 $\langle \cdots \rangle_*$ の下での後ろ向き微分により，もう一つの加速度

$$\begin{aligned} D_* v(t) &\equiv \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t} \{v(t) - v(t-\Delta t)\} \right\rangle_* \\ &= \beta v(t) + K(x(t)) \end{aligned} \tag{5.6}$$

が定義できる．一方，(5.1) より速度 $v(t)$ 自身は $x(t)$ の微分のため，$x(t+\Delta t) - x(t)$ と $x(t) - x(t-\Delta t)$ は同じ極限に収束して $Dx(t) = D_* x(t) = v(t)$ となり，(5.4) と (5.6) を合わせて，時間の向きに対して対称な加速度が

$$a(t) = \frac{1}{2}\left(DD_* + D_* D\right) x(t) = K(t) = -\frac{1}{m}\frac{\partial V(x(t))}{\partial x(t)} \tag{5.7}$$

と求められる．得られた結果は，ニュートンの運動方程式に対応する．

次に，β, K, σ_0 が十分に大きく，(5.2) の慣性力が粘性抵抗等に比べて無視できる場合を考えると，確率微分方程式は $x(t)$ の 1 階微分方程式

$$dx(t) = b(x(t), t)dt + \sigma dW(t) \tag{5.8}$$

の構造になり，拡散係数 $\frac{\sigma^2}{2}$ のブラウン運動の理論に移行する．以下，ネルソンは確率過程と量子力学を結び付ける議論を改めて (5.8) から組み立てるが，(5.2) から示唆された加速度の定義 (5.7) は，(5.8) の確率過程においてもそのまま用いる立場をとる．

さて，(5.8) から時間の前向き微分の意味で，

$$Dx(t) \equiv \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t} \{x(t+\Delta t) - x(t)\} \right\rangle = b(x(t), t) \tag{5.9}$$

が導かれる．(5.8) も時間の向きについて対称ではないので，時刻 t から $s \leq t$ に向けて推移するウィーナー過程を $dW_*(t)$ として

$$dx(t) = b(x(t), t)_* dt + \sigma dW_*(t) \tag{5.10}$$

と置くと，時間についての後ろ向き微分の意味で

$$D_* x(t) \equiv \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t} \{x(t) - x(t-\Delta t)\} \right\rangle_* = b_*(x(t), t) \tag{5.11}$$

を得る．時間の前向きと後ろ向きの微分は，$x(t)$ の任意関数 $F(x(t), t)$ に対しても定義することができ，(5.9) から $\langle \Delta W(t)^2 \rangle = \Delta t$ に注意して，

$$DF(x(t), t) = \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t} \left\{ F\big(x(t) + \Delta x(t), t + \Delta t\big) - F\big(x(t), t\big) \right\} \right\rangle$$

$$= \frac{\partial}{\partial t}F + b\frac{\partial F}{\partial x} + \frac{\sigma^2}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \tag{5.12}$$

が得られる．同様に後ろ向きの微分に対しては，(5.11) より

$$\begin{aligned} D_*F(x(t),t) &= \lim_{\Delta t \to +0} \left\langle \frac{1}{\Delta t}\left\{F\big(x(t),t\big) - F\big(x(t) - \Delta x(t), t - \Delta t\big)\right\}\right\rangle_* \\ &= \frac{\partial}{\partial t}F + b_*\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{\sigma^2}{2}\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} \end{aligned} \tag{5.13}$$

である．(5.12), (5.13) は，$F(x(t),t) = x(t)$ と置けば，それぞれ b, b_* の定義に戻る．また，$F = b_*$, $F = b$ と置けば，それぞれ

$$Db_* = DD_*x = \frac{\partial}{\partial t}b_* + b\frac{\partial}{\partial x}b_* + \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}b_*\,, \tag{5.14}$$

$$D_*b = D_*Dx = \frac{\partial}{\partial t}b + b_*\frac{\partial}{\partial x}b - \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}b \tag{5.15}$$

となる．この結果を (5.7) に代入して，

$$a = -\frac{1}{m}\frac{\partial V(x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t}v + v\frac{\partial}{\partial x}v - u\frac{\partial}{\partial x}u - \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}u\,, \tag{5.16}$$

ただし，

$$v = \frac{1}{2}(b + b_*)\,, \quad u = \frac{1}{2}(b - b_*) \tag{5.17}$$

を得る．ここで v, u は，何等かの意味での流れの場を与えているが，その意味を明らかにするために確率過程 (5.8), (5.10) の背後にあるフォッカー–プランク方程式を考察しなくてはならない．

さて，付録 B で示されたように，(B.13) の確率微分方程式は，(B.26) のフォッカー–プランク方程式を満たす確率密度 $P(x,t)$ を導いた*1)．この関係を (5.8), (5.10) に適用すると，方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(bP\big) + \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\,, \tag{5.18}$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\big(b_*P\big) - \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \tag{5.19}$$

が得られる．さらに，二つの式の和と差をとり (5.17) を考慮すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}P = -\frac{\partial}{\partial x}\big(vP\big)\,, \tag{5.20}$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial x}\left\{-uP + \frac{1}{2}\sigma^2\frac{\partial P}{\partial x}\right\} \tag{5.21}$$

となる．(5.20) は，P を確率密度，vP を確率流れの密度（v 自身はドリフト速度と呼ばれる）とする連続の方程式であり，また u は (5.21) から，

---

*1) 確率密度は，$\Delta x P(x,t) = (x(t)$ をΔx に見出す確率$)$ として定義される．$P(x,t)$ は，(B.18) で導入した遷移確率密度 $P(x,t|y,s)$ の初期値を固定したものと考えればよい．また，(B.13) の μ は，この節の b, b_* に対応する．

$$u = \frac{\sigma^2}{2}\frac{\partial}{\partial x}\log P \tag{5.22}$$

を満たして，P と関数関係を持つ．

以上の結果を量子力学と結び付けるために，シュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi + V\Psi \tag{5.23}$$

に，波動関数を振幅と位相で表した $\Psi = Re^{\frac{i}{\hbar}S}$, $(R, S:$ 実関数$)$ を代入して，R, S に関する連立方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}(R^2) + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}R^2\right) = 0\,, \tag{5.24}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2} = 0 \tag{5.25}$$

に分解する．このとき (5.25) は，ボームの量子ポテンシャル $V_Q = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2}$ の補正を受けた有効ポテンシャル $V_{\rm eff} = V + V_Q$ の下で運動する粒子のハミルトン–ヤコビの方程式 (A.45) と考えることができる*2)．ここで，S はハミルトンの主関数であるから $p = \frac{\partial S}{\partial x}$ は粒子の運動量 (A.44) になり，従って $\frac{1}{m}p = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}$ は粒子速度となる．また，$R^2 = |\psi|^2$ は量子論的な確率密度であるから，これを P に同一視すれば，(5.24) は (5.20) と等価になる．こうして，

$$v = \frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x} \quad , \quad u = \frac{\sigma^2}{R}\frac{\partial R}{\partial x} = \sigma^2\frac{\partial}{\partial x}\log R \tag{5.26}$$

を得て，確率過程から導かれた v, u は，波動関数の S, R 成分を与える．さらに，(5.26) の関係を，確率過程とニュートンの運動方程式を結び付ける (5.16) に代入すると，

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V - \frac{m\sigma^4}{2}\frac{1}{R}\frac{\partial^2 R}{\partial x^2}\right] = 0 \tag{5.27}$$

となる．この式の括弧内は，$\sigma = \sqrt{\frac{\hbar}{m}}$ と置けば，(5.25) に一致する．(5.27) を積分すると (5.25) に付加関数 $f(t) = \frac{dF(t)}{dt}$ を付け加えた形になるが，$S + F$ を改めて S と記せば，(5.25) もそのままの形で成立して，確率過程とシュレディンガー方程式の諸関係が全て明らかになった．

ネルソンの確率過程量子化法は，古典的粒子のブラウン運動に近い描像から量子力学の波動関数が持つ情報を引き出すもので，ボームの量子ポテンシャルの考え方を一歩進めて，量子力学の解釈に新しい側面を付け加えた．しかし，確率過程の根底にある白色ノイズの意味は不明のままであり，またその手法

*2) 1952 年，D. ボームはシュレディンガー方程式をこの形のハミルトン–ヤコビ方程式に持ち込んだ上で，量子力学を決定論的な古典力学から考えようとした．量子ポテンシャルの導入は，背景にあるエーテルの揺らぎのようなものを想起させる，ある種の**隠れた変数**の理論とも言えた．

は非相対論的理論形式に強く依存しており，多粒子系への拡張も容易ではなかった．

練習問題 5.1.1

初期状態が $\Psi(x,0)=\delta(x-x_0)$ で与えられる 1 次元自由粒子を，ネルソンの立場の確率過程で考えた場合のドリフト速度 b, b_* を求めよ．

解答 粒子質量を m とすると，系のハミルトニアン演算子は $\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ であり，時刻 t の波動関数は

$$\Psi(x,t)=e^{-\frac{i}{\hbar}t\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)}\delta(x)=\int\frac{dk}{2\pi}e^{-i\frac{t\hbar}{2m}k^2+ik(x-x_0)}$$
$$=\sqrt{\frac{2mi\pi}{t\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}\frac{m}{2t}(x-x_0)^2}$$

になる．そこで，$\Psi=Re^{\frac{i}{\hbar}S}$ で定義される絶対値 R と位相 S は，それぞれ

$$R(x,t)=\sqrt{\frac{2m\pi}{t\hbar}},\quad S(x,t)=\frac{m}{2t}(x-x_0)^2+\hbar\pi\left(\frac{1}{2}+2n\right),\ (n:\text{整数})$$

となり，これより

$$v=\frac{1}{m}\frac{\partial S}{\partial x}=\frac{x-x_0}{t},\quad u=\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial}{\partial x}\log R=0$$

を得て，ドリフト速度が

$$b=b_*=v=\frac{x-x_0}{t}$$

と決まる．結果として得られたドリフト速度 v は，自由粒子であることを反映して座標系の平行移動 $x\to x+c,\ x_0\to x_0+c$ の下で不変となっている．しかしドリフト速度の大きさは，同一時刻であっても観測点 x や初期位置 x_0 に依存して変わるため，古典的な自由粒子の速度とは物理的意味が異なるものになっている．□

5.2 仮想時間のランジュバン方程式と経路積分

ネルソンの確率過程量子化法は，量子力学の解釈に切り込む興味深い考え方であったが，多体系や相対論的力学系まで含めた幅広い応用には適していなかった．1980 年にパリジ-ウーは，確率過程を記述する仮想時間 τ の長時間極限を通常の量子力学に一致させる，適用範囲の広い巧妙な確率過程量子化法を提案した．

いま，考えている系を記述する力学変数と作用をそれぞれ $\{q_i(t)\}$, $S[q]$ とし，これらを虚数時間 $t=-i\bar{t}$ に解析接続した形を $q_i(t)=\bar{q}_i(\bar{t})$, $S[q]=i\bar{S}[\bar{q}]$ とする．確率過程の方程式には虚数単位 i が現れず，τ の長時間極限で移行できるのは，$\bar{S}[\bar{q}]$ で記述される系であると考える．

さて，$\tau \to \infty$ でこの系に移行させる確率過程の変数 $\bar{q}_i(\tau, \bar{t})$ を導入し，古典的運動方程式 $\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} = 0$ がドリフト速度 0 に対応するような，ランジュバン方程式

$$\boxed{\frac{\partial \bar{q}_i(\tau, \bar{t})}{\partial \tau} = -\frac{\delta \bar{S}[\bar{q}]}{\delta \bar{q}_i(\tau, \bar{t})} + \sqrt{2\hbar}\eta_i(\tau, \bar{t})} \tag{5.28}$$

を設定する．ここで，白色ノイズは (B.4) で与えた期待値

$$\langle \eta_i(\tau, \bar{t}) \rangle_\eta = 0, \tag{5.29}$$

$$\langle \eta_i(\tau, \bar{t})\eta_j(\tau', \bar{t}') \rangle_\eta = \delta_{ij}\delta(\tau - \tau')\delta(\bar{t} - \bar{t}') \tag{5.30}$$

により特徴づけられる．(5.28) はウィーナー過程 $dW_i = \eta_i dt$ を使って書けば，τ を時間とする確率微分方程式 $d\bar{q}_i = -\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} d\tau + \sqrt{2\hbar} dW_i$ のことであるから，付録の (B.13) と (B.26) の対応から，$\{\bar{q}_i(\bar{t})\}$ に関する確率密度 $P[\bar{q}, \tau]$ はフォッカー–プランクの（汎関数）方程式

$$\frac{\partial}{\partial \tau} P = \sum_i \int d\bar{t} \frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} \left\{ \hbar \frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} + \frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right\} P \tag{5.31}$$

を満たす．ここで $P[\bar{q}, \tau] = e^{-\frac{1}{2\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}\Psi[\bar{q}, \tau]$ と置くと，

$$\begin{aligned} &\hbar \frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} \left\{ \frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} + \frac{1}{\hbar}\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right\} e^{-\frac{1}{2\hbar}\bar{S}[\bar{q}]} \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}\hbar \left(\frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} - \frac{1}{2\hbar}\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right) \left(\frac{\delta}{\delta \bar{q}_i} + \frac{1}{2\hbar}\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right) \\ &= e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}\hbar \left\{ \frac{\delta^2}{\delta \bar{q}_i^2} + \frac{1}{2\hbar}\frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \bar{q}_i^2} - \frac{1}{4\hbar^2}\left(\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right)^2 \right\} \end{aligned} \tag{5.32}$$

に注意して，フォッカー–プランク方程式を

$$\begin{aligned} &\hbar \frac{\partial}{\partial \tau}\Psi = -2\hat{H}_{\mathrm{FP}}\Psi\,, \\ &\hat{H}_{\mathrm{FP}} = \sum_i \int d\bar{t} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2}\frac{\delta^2}{\delta \bar{q}_i^2} - \frac{\hbar}{4}\frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \bar{q}_i^2} + \frac{1}{8}\left(\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i} \right)^2 \right\}, \end{aligned} \tag{5.33}$$

と書くことができる．ここで $\hat{H}_{\mathrm{FP}}$ は質量=1 の粒子のハミルトニアンを汎関数変数に拡張したエルミート演算子であり，ポテンシャル $V_i = \frac{1}{8}\left(\frac{\delta \bar{S}}{\delta \bar{q}_i}\right)^2 - \frac{\hbar}{4}\frac{\delta^2 \bar{S}}{\delta \bar{q}_i^2}$ が非負で $\bar{q}_i$ の増大と共に増加すると仮定すれば，$\hat{H}_{\mathrm{FP}}$ の固有値方程式を

$$\hat{H}_{\mathrm{FP}}\Psi_n = E_n\Psi_n\ ,\ \ (0 = E_0 \le E_1 \le E_2 \le \cdots) \tag{5.34}$$

と置くことができる．従ってシュレディンガー型方程式 (5.33) の解は

$$\Psi[\bar{q}, \tau] = \sum_{n=0}^{\infty} c_c e^{-\frac{2}{\hbar}E_n\tau}\Psi_n[\bar{q}] \tag{5.35}$$

と展開され，確率密度 $P[\bar{q},\tau]$ の $\tau\to\infty$ での漸近形が

$$P[\bar{q},\tau] = e^{-\frac{1}{2\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}\sum_{n=0}^{\infty} c_c e^{-\frac{2}{\hbar}E_n\tau}\Psi_n[\bar{q}]$$
$$\to e^{-\frac{1}{2\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}c_0\Psi_0[\bar{q}]\,,\ (\tau\to\infty) \tag{5.36}$$

と評価される．ここで Ψ_0 は，(5.32) から $\left(\frac{\delta}{\delta\bar{q}_i}+\frac{1}{2\hbar}\frac{\delta\bar{S}}{\delta\bar{q}_i}\right)\Psi_0=0$ を解いて決まり，$\Psi_0[\bar{q}]\propto e^{-\frac{1}{2\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}$ となる．従って，規格化を考慮して

$$\lim_{\tau\to\infty} P[\bar{q},\tau] = \frac{e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}}{\int\mathcal{D}\bar{q}e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}}\,,\quad \left(\mathcal{D}\bar{q}=\prod_i\mathcal{D}\bar{q}_i\right) \tag{5.37}$$

である．こうして，まずランジュバン方程式 (5.28) を解いて $\bar{q}_i(\tau,\bar{t})$ を求め，その任意関数 $F\left[\bar{q}(\tau,\bar{t})\right]$ の白色ノイズによる期待値を計算した上で仮想時間に関する長時間極限をとると，

$$\lim_{\tau\to\infty}\langle F[\bar{q}(\tau,\bar{t})]\rangle_\eta = \lim_{\tau\to\infty}\int\mathcal{D}\bar{q}P[\bar{q},\tau]F\left[\bar{q}\right] \tag{5.38}$$
$$= \frac{\int\mathcal{D}\bar{q}F[\bar{q}]e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}}{\int\mathcal{D}\bar{q}e^{-\frac{1}{\hbar}\bar{S}[\bar{q}]}} \tag{5.39}$$

に至る．以上が，パリジ-ウーの確率過程量子化法の概要であるが，正準量子化は全く経由しておらず，議論を立てる上で必要となるものは $\sqrt{2\hbar}\eta_i$ の揺動力と，古典運動方程式の形を与える $\frac{\delta\bar{S}}{\delta\bar{q}_i}$ であるため，応用範囲の広い手法となっている．

練習問題 5.2.1

実時間における 1 次元調和振動子の作用

$$S[q]=\frac{m}{2}\int dt\left\{\left(\frac{dq}{dt}\right)^2-\omega^2q^2\right\}$$

を基に，正準量子化で求めた 2-点関数を虚数時間に解析接続した結果と，パリジ-ウーの確率過程量子化法で求めた結果を比較せよ．

解答　（正準）量子化された系のハミルトニアン演算子は

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2=\hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a}+\frac{1}{2}\right)\,,\ (\ [\hat{a},\hat{a}^\dagger]=1\ ).$$

ただし，$\hat{q}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger+\hat{a})$, $\hat{p}=i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger-\hat{a})$ であり，ハイゼンベルク表示の位置演算子は

$$\hat{q}(t)=e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{q}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t}+\hat{a}e^{-i\omega t})$$

と書けた．従って，基底状態を $\hat{a}|0\rangle=0$, $\langle 0|0\rangle=1$, $t=-i\bar{t}$ として

$$\langle 0|\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|0\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega}e^{-i\omega(t_1-t_2)}=\frac{\hbar}{2m\omega}e^{-\omega(\bar{t}_1-\bar{t}_2)}$$

である．2-点関数を定義する T-積については，時間を虚軸に解析接続したときの大小関係を $t_1 > t_2 \Leftrightarrow \bar{t}_1 > \bar{t}_2$ と定義して

$$\langle 0|T\hat{q}(t_1)\hat{q}(t_2)|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}e^{-i\omega|t_1-t_2|} = \frac{\hbar}{2m\omega}e^{-\omega|\bar{t}_1-\bar{t}_2|}$$

が得られる．一方，$S[q] = i\bar{S}[\bar{q}]$, $(t = -i\bar{t}\,)$ で定義される虚数時間の作用は

$$\bar{S}[\bar{q}] = \frac{m}{2}\int d\bar{t}\left\{\left(\frac{d\bar{q}}{dt}\right)^2 + \omega^2\bar{q}^2\right\}$$

であり，$\frac{\delta\bar{S}[\bar{q}]}{\delta\bar{q}} = -m\left(\frac{\partial^2}{\partial\bar{t}^2} - \omega^2\right)\bar{q}$ から基本となるランジュバン方程式は

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\bar{q}(\tau,\bar{t}\,) = m\left(\frac{\partial^2}{\partial\bar{t}^2} - \omega^2\right)\bar{q}(\tau,\bar{t}\,) + \sqrt{2\hbar}\eta(\tau,\bar{t}\,)$$

となる．この方程式の解 $q^\eta(\tau,\bar{x})$ で，同次解を除き，初期条件 $q^\eta(0,\bar{x}) = 0$ を満たす解を，演算子的に

$$q^\eta(\tau,\bar{t}\,) = \sqrt{2\hbar}\hat{D}^{-1}\eta(\tau,\bar{t}\,)\,, \qquad \left(\hat{D} = \left[\frac{\partial}{\partial\tau} - m\left(\frac{\partial^2}{\partial\bar{t}^2} - \omega^2\right)\right]\right)$$

と表す．このとき，$\langle\eta(\tau_1,\bar{t}_1)\eta(\tau_2,\bar{t}_2)\rangle_\eta = \delta(\tau_1-\tau_2)\delta(\bar{t}_1-\bar{t}_2)$ に注意して，$q^\eta(\tau,\bar{x})$ の 2 次の期待値は，

$$\langle q^\eta(\tau_1,\bar{t}_1)q^\eta(\tau_2,\bar{t}_2)\rangle_\eta = 2\hbar\hat{D}_1^{-1}\hat{D}_2^{-1}\delta(\tau_1-\tau_2)\delta(\bar{t}_1-\bar{t}_2)$$

と書ける．ここで τ 微分の逆演算子は，初期条件より $\partial_\tau^{-1}f(\tau) = \int_0^\tau d\tau' f(\tau')$ および $(\partial_\tau+\hat{K})^{-1}f(\tau) = e^{-\tau\hat{K}}\int_0^\tau d\tau' e^{\tau'\hat{K}}f(\tau')$ 等の意味になり，$\tau_1 = \tau_2 \gg 1$ の漸近的領域では $\hat{K}_i = -m(\bar{\partial}_i^2 - \omega^2)$, $(i = 1,2)$ として

$$\begin{aligned}
&\hat{D}_1^{-1}\hat{D}_2^{-1}\delta(\tau_1-\tau_2) \\
&= \int\frac{d\xi}{2\pi}e^{i\xi(\tau_1-\tau_2)}\frac{1-e^{-(i\xi+\hat{K}_1)\tau_1}}{i\xi+\hat{K}_1}\frac{1-e^{-(-i\xi+\hat{K}_2)\tau_2}}{-i\xi+\hat{K}_2} \\
&\overset{\tau_1=\tau_2\gg 1}{\simeq} \int\frac{d\xi}{2\pi}\frac{1}{(i\xi+\hat{K}_1)(-i\xi+\hat{K}_2)} = \frac{1}{\hat{K}_1+\hat{K}_2}.
\end{aligned} \tag{5.40}$$

次いで，$\delta(\bar{t}_1-\bar{t}_2)$ を積分表示で表し，上の演算子を作用させると，

$$\begin{aligned}
\langle q^\eta(\tau,\bar{t}_1)q^\eta(\tau,\bar{t}_2)\rangle_\eta &= \frac{\hbar}{2\pi m}\int dk\frac{e^{ik(\bar{t}_1-\bar{t}_2)}}{(k+i\omega)(k-i\omega)} \\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}e^{-\omega|\bar{t}_1-\bar{t}_2|}
\end{aligned}$$

となって，正準量子化で求めた結果と一致する．□

練習問題 5.2.2

前問 5.2.1 におけるランジュバン方程式は，$\bar{t}$ についてのフーリエ係数

$$\tilde{q}(\tau,k) = \int\frac{d\bar{t}}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik\bar{t}}\bar{q}(\tau,\bar{t}\,)\,,$$

$$\tilde{\eta}(\tau,k)=\int\frac{d\bar{t}}{\sqrt{2\pi}}e^{-ik\bar{t}}\eta(\tau,\bar{t}\,),$$

$$\langle\tilde{\eta}(\tau_1,k_1)\tilde{\eta}(\tau_2,k_2)\rangle_\eta=\delta(\tau_1-\tau_2)\delta(k_1+k_2)$$

に対して書き下すと，

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\tilde{q}(\tau,k)=-m(k^2+\omega^2)\tilde{q}(\tau,k)+\sqrt{2\hbar}\tilde{\eta}(\tau,k)$$

である．この方程式の一般解を基に，前問の 2-点関数を再評価せよ．

解答 同次解を含めた上の方程式の一般解は，

$$\tilde{q}(\tau,k)=e^{-\tau m(k^2+\omega^2)}\left[\int_0^\tau d\tau' e^{\tau' m(k^2+\omega^2)}\sqrt{2\hbar}\tilde{\eta}(\tau',k)+\tilde{q}(0,k)\right].$$

従って，

$$\begin{aligned}\langle\tilde{q}(\tau_1,k_1)\tilde{q}(\tau_2,k_2)\rangle_\eta&=\int_0^{\tau_1}d\tau_1'\int_0^{\tau_2}d\tau_2' e^{(\tau_1'-\tau_1)m(k_1^2+\omega^2)}e^{(\tau_2'-\tau_2)m(k_2^2+\omega^2)}\\&\quad\times 2\hbar\delta(\tau_1'-\tau_2')\delta(k_1+k_2)\\&\quad+e^{-\tau_1 m(k_1^2+\omega^2)}e^{-\tau_2 m(k_2^2+\omega^2)}\tilde{q}(0,k_1)\tilde{q}(0,k_2)\\&=2\hbar\delta(k_1+k_2)\frac{e^{-(\tau_1+\tau_2)m(k^2+\omega^2)}}{2m(k_1^2+\omega^2)}\left(e^{-2\min(\tau_1,\tau_2)m(k_1^2+\omega^2)}-1\right)\\&\quad+e^{-\tau_1 m(k_1^2+\omega^2)}e^{-\tau_2 m(k_2^2+\omega^2)}\tilde{q}(0,k_1)\tilde{q}(0,k_2).\end{aligned}$$

ここで，$\tau_1=\tau_2=\tau\to\infty$ の極限をとると，

$$\lim_{\tau\to\infty}\langle\tilde{q}(\tau,k_1)\tilde{q}(\tau,k_2)\rangle_\eta=\delta(k_1+k_2)\frac{\hbar}{m(k_1^2+\omega^2)}.$$

最後に，この式を k について逆フーリエ変換を行って $\bar{t}$-表示に移ると，

$$\begin{aligned}\lim_{\tau\to\infty}\langle\bar{q}(\tau,\bar{t}_1)\bar{q}(\tau,\bar{t}_2)\rangle_\eta&=\int\frac{dk_1}{\sqrt{2\pi}}\int\frac{dk_2}{\sqrt{2\pi}}e^{ik_1\bar{t}_1+ik_2\bar{t}_2}\delta(k_1+k_2)\frac{\hbar}{m(k_1^2+\omega^2)}\\&=\frac{\hbar}{2\pi m}\int dk_1\frac{e^{ik_1(\bar{t}_1-\bar{t}_2)}}{k_1^2+\omega^2}=\frac{\hbar}{2m\omega}e^{-\omega|\bar{t}_1-\bar{t}_2|}\end{aligned}$$

となって，前問の結果と一致する．従って，グリーン関数 $\hat{D}^{-1}$ を用いて 2-点関数を求めた手順は，漸近的な境界条件で消える不要な項を予め除いた特殊解に基づき，期待値を評価した手順となっている．□

5.3 ゲージ理論への応用

パリジ–ウーの確率過程量子化の手法は，ゲージ場の量子化の問題においても新しい視点をもたらした．その本質を知るために，簡単な電磁場の量子化を考える．その目的のために，まず時空座標を $(x^0,x^i)=(-i\bar{x}_4,\bar{x}_i)$ と解析接続して得られる 4 次元ユークリッド空間に，電磁場の 4 次元ベクトルポテン

シャル $\{\bar{A}_\mu\}$ を $(A^0, A^i) = (-i\bar{A}_4, \bar{A}_i)$ により導入する．このとき，ミンコウスキー時空における電磁場のラグランジアン密度は，

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_A &= -\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} = -\frac{1}{4}\bar{F}_{\mu\nu}\bar{F}^{\mu\nu}\,, \\ &\left(\bar{F}_{\mu\nu} = \bar{\partial}_\mu\bar{A}_\nu - \bar{\partial}_\nu\bar{A}_\mu\right) \end{aligned} \tag{5.41}$$

となり*3)，$d^4\Omega = -id^4\bar{\Omega} = -id\bar{t}dV$ としてユークリッド空間の作用が

$$\begin{aligned} S[A] &= \int d^4\Omega\left(-\frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right) = i\int d^4\bar{\Omega}\underbrace{\left(\frac{1}{4}\bar{F}_{\mu\nu}\bar{F}_{\mu\nu}\right)}_{\bar{\mathcal{L}}_{\bar{A}}} \\ &= i\bar{S}[\bar{A}] \end{aligned} \tag{5.42}$$

と定義される．これから，ユークリッド空間での作用の変分は，

$$\frac{\delta\bar{S}[\bar{A}]}{\delta\bar{A}_\mu(\bar{x})} = -\left[\bar{\partial}^2\delta_{\mu\nu} - \bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\nu\right]\bar{A}_\nu(\bar{x}) \tag{5.43}$$

となる．

さて，作用 $\bar{S}[\bar{A}]$ を基に電磁場の確率過程量子化を実行するために，$\bar{A}_\mu(\bar{x})$ を仮想時間 τ を含む 5 次元空間の場 $\bar{A}_\mu(\tau, \bar{x})$ に拡張し，(5.28) に対応するランジュバン方程式

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\bar{A}_\mu(\tau, \bar{x}) = \left[\bar{\partial}^2\delta_{\mu\nu} - \bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\nu\right]\bar{A}_\nu(\tau, \bar{x}) + \sqrt{2\hbar}\eta_\mu(\tau, \bar{x}) \tag{5.44}$$

を設定する．ここで $\eta_\mu(\tau, \bar{x})$ は，期待値

$$\begin{aligned} \langle\eta_\mu(\tau, \bar{x})\rangle_\eta &= 0\,, \\ \langle\eta_\mu(\tau, \bar{x})\eta_\nu(\tau', \bar{x}')\rangle_\eta &= \delta_{\mu\nu}\delta(\tau - \tau')\delta^{(4)}(\bar{x} - \bar{x}') \end{aligned} \tag{5.45}$$

により特徴づけられる白色ノイズである．ランジュバン方程式 (5.44) が通常の電磁場の運動方程式と著しく異なる点は，左辺に τ に関する微分項があるため，これ自体がゲージ固定項の役割を果し，運動方程式の逆（グリーン関数）が存在することである．実際，$\bar{A}_\mu(\tau, \bar{x})$ に作用する微分演算子を

$$\begin{aligned} \hat{D}_{\mu\nu} &= \delta_{\mu\nu}\left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \bar{\partial}^2\right) + \bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\nu \\ &= P^T_{\mu\nu}(\bar{\partial})\left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \bar{\partial}^2\right) + P^L_{\mu\nu}(\bar{\partial})\frac{\partial}{\partial\tau}\,, \end{aligned} \tag{5.46}$$

ただし

$$P^T_{\mu\nu}(\bar{\partial}) = \delta_{\mu\nu} - \frac{\bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\nu}{\bar{\partial}^2}\,,\quad P^L_{\mu\nu}(\bar{\partial}) = \frac{\bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\nu}{\bar{\partial}^2} \tag{5.47}$$

---

*3) x^μ を含めてベクトルは，$A^0 = A_0 = -i\bar{A}_4$, $A^i = -A_i = \bar{A}_i$ と解析接続されて，$A_\mu B^\mu = -\bar{A}_\mu\bar{B}_\mu$ である．一方，x^μ による微分は，$\partial^0 = \partial_0 = i\bar{\partial}_4$, $\partial^i = -\partial_i = -\bar{\partial}_i$ となり，$\partial_\mu\partial^\mu = -\bar{\partial}_\mu\bar{\partial}_\mu$ および $\partial_\mu A^\mu = \bar{\partial}_\mu\bar{A}_\mu$ が得られて，(5.41) が確かめられる．

と表すと，$P_{\mu\nu}^{T}, P_{\mu\nu}^{L}$ がベクトルを直交成分に分解する射影演算子 ($P^{T2} = P^{T}$, $P^{L2} = P^{L}$, $P^{T} \cdot P^{L} = 0$) であることに注意して，

$$\left(\hat{D}^{-1}\right)_{\mu\nu} = P_{\mu\nu}^{T}(\bar{\partial})\left(\frac{\partial}{\partial\tau} - \bar{\partial}^2\right)^{-1} + P_{\mu\nu}^{L}(\bar{\partial})\left(\frac{\partial}{\partial\tau}\right)^{-1} \tag{5.48}$$

となる．従って，(5.44) の解は，演算子的に

$$\bar{A}_{\mu}^{\eta}(\tau, \bar{x}) = \left(\hat{D}^{-1}\right)_{\mu\alpha}\eta_{\alpha}(\tau, \bar{x}) \tag{5.49}$$

と表され，$\bar{A}_{\mu}^{\eta}(\tau, \bar{x})$ の 2 次の期待値に対し

$$\begin{aligned}
\langle \bar{A}_{\mu}^{\eta}(\tau_1, \bar{x}_1)\bar{A}_{\nu}^{\eta}(\tau_2, \bar{x}_2)\rangle_{\eta} &= 2\hbar D_{1\mu\alpha}^{-1}D_{2\nu\beta}^{-1}\delta_{\alpha\beta}\delta(\tau_1 - \tau_2)\delta^{(4)}(\bar{x}_1 - \bar{x}_2) \\
&= 2\hbar\int\frac{d^4\bar{k}}{(2\pi)^4}e^{i\bar{k}\cdot(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)} \\
&\times\left[P_{\mu\nu}^{T}(\bar{k})\left(\frac{\partial}{\partial\tau_1} + \bar{k}^2\right)^{-1}\left(\frac{\partial}{\partial\tau_2} + \bar{k}^2\right)^{-1}\delta(\tau_1 - \tau_2)\right. \\
&\left. + P_{\mu\nu}^{L}(\bar{k})\left(\frac{\partial}{\partial\tau_1}\right)^{-1}\left(\frac{\partial}{\partial\tau_2}\right)^{-1}\delta(\tau_1 - \tau_2)\right]
\end{aligned} \tag{5.50}$$

の表式が得られる．ここで，(5.50) の右辺第 1 項は電磁場の横波成分 $A_{\mu}^{\eta T}(\tau, \bar{x}) = P_{\mu\nu}^{T}(\bar{\partial})A^{\eta\nu}(\tau, \bar{x})$ からの寄与であり，練習問題 5.2.1 の $\hat{K}_1 = \hat{K}_2 = \bar{k}^2$ の場合に対応していて，$\tau_1 = \tau_2 = \tau \gg 1$ の漸近形の意味で，

$$\langle \bar{A}_{\mu}^{\eta T}(\tau, \bar{x}_1)\bar{A}_{\nu}^{\eta T}(\tau, \bar{x}_2)\rangle_{\eta} = 2\hbar\int\frac{d^4\bar{k}}{(2\pi)^2}e^{i\bar{k}\cdot(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)}\frac{P_{\mu\nu}^{T}(\bar{k})}{\bar{k}^2} \tag{5.51}$$

を導く．得られた結果は，ランダウ・ゲージでの伝搬関数である．

一方，(5.50) の右辺第 2 項は，電磁場の縦波成分 $A_{\mu}^{\eta L}(\tau, \bar{x}) = P_{\mu\nu}^{L}(\bar{\partial})A^{\eta\nu}(\tau, \bar{x})$ からの寄与を表し，横波と同じく逆演算子の定義 $(\partial_{\tau})^{-1}f(\tau) = \int_0^{\tau} d\tau' f(\tau')$ の下で，

$$\int_0^{\tau_1} d\tau_1'\int_0^{\tau_2} d\tau_2'\delta(\tau_1' - \tau_2') = \min(\tau_1, \tau_2) = \begin{cases}\tau_1\,, & (\tau_1 < \tau_2)\,, \\ \tau_2\,, & (\tau_2 < \tau_1)\end{cases} \tag{5.52}$$

の形となる．従って，$\tau_1 + \epsilon = \tau_2 = \tau$, $(\epsilon = +0)$ として

$$\langle \bar{A}_{\mu}^{\eta L}(\tau, \bar{x}_1)\bar{A}_{\nu}^{\eta L}(\tau, \bar{x}_2)\rangle_{\eta} = 2\hbar\tau\int\frac{d^4\bar{k}}{(2\pi)^4}e^{i\bar{k}\cdot(\bar{x}_1 - \bar{x}_2)}P_{\mu\nu}^{L}(\bar{k}) \tag{5.53}$$

となり，$\tau \to \infty$ で発散する．ただし，このような縦波項の寄与は，明らかにゲージ不変な電磁場成分 $F_{\mu\nu}$ の 2-点関数からは消える．以上がパリジ–ウーの与えた QED の確率過程形式である．この手法は非可換ゲージ場の理論にも拡張可能であり，自由場のみならず相互作用のある場合も含めて，量子力学系・場の量子論の諸量を計算する有効な手段となっている．

練習問題 5.3.1

作用 $\bar{S}[\bar{q}]$ で記述される（1 自由度の）系に対し，フォッカー-プランク方程式の解である確率密度 $P[\bar{q},\tau]$ は，付録の (B.28) によれば

$$P[\bar{q},\tau]=\int \mathcal{D}\eta\delta(\bar{q}-\bar{q}_\eta)e^{-\frac{1}{2}\int_0^\tau d\tau\langle\eta^2\rangle},\quad \left(\langle\eta^2\rangle=\int d\bar{t}\eta^2\right)$$

と書ける[*4)]．この形を基に，分配関数 $Z[J,\tau]=\int\mathcal{D}\bar{q}e^{-\frac{1}{\hbar}\int d\tau\langle\bar{q}J\rangle}P[\bar{q},\tau]$ を作用の汎関数積分として表せ．

解答 $\bar{q}_\eta$ を η の汎関数と考えると，(5.28) が満たされる近傍で（$(\tau,\bar{t})$ の積分を和で単純化して書くと）$(\bar{q}_\eta-\bar{q})_i\simeq\sum_j\frac{\delta\bar{q}_\eta(i)}{\delta\eta(j)}\left[\eta-\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\dot{\bar{q}}+\frac{\delta\bar{S}}{\delta\bar{q}}\right)\right]_j$ である．従って，

$$\begin{aligned}Z[J,\tau]&=\int\mathcal{D}\bar{q}\int\mathcal{D}\eta\delta(\bar{q}-\bar{q}_\eta)e^{-\frac{1}{2}\int_0^\tau d\tau\langle\eta^2\rangle}\\&=\int\mathcal{D}\bar{q}\det\left[\frac{\delta\eta}{\delta\bar{q}}\right]e^{-\frac{1}{4\hbar}\int_0^\tau d\tau\langle(\dot{\bar{q}}+\frac{\delta\bar{S}}{\delta\bar{q}})^2\rangle}.\end{aligned}$$

ここで，行列式は，$\det(A)=e^{\mathrm{tr}\log(A)}$ から

$$\begin{aligned}\det\left[\frac{\delta\eta}{\delta\bar{q}}\right]&=\det\left[\left\{\partial_\tau+\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}\delta\bar{q}'}\right\}\delta(\tau-\tau')\right]\\&=\exp\left[\mathrm{tr}\log\left\{\partial_\tau+\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}\delta\bar{q}'}\right\}\delta(\tau-\tau')\right]\\&=N\exp\left[\sum_i\log\left\{1+\left(\partial_\tau^{-1}\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}\delta\bar{q}}\right)\right\}_{ii}\right],\quad\left(N=e^{\mathrm{tr}\log(\partial_\tau)}\right)\end{aligned}$$

であり，$(\partial_\tau^{-1})_{ij}=\int_0^\tau d\tau(\tau_i-\tau_j)=\theta(\tau_i-\tau_j)$ と考えて対数関数を展開し，$\int d\tau'\theta(\tau-\tau')\theta(\tau'-\tau)=0$ および $\theta(0)=\frac{1}{2}$ 等を考慮すると，実際の展開は 1 次項で終わる．こうして，

$$\det\left[\frac{\delta\eta}{\delta\bar{q}}\right]=Ne^{\frac{1}{2}\int_0^\tau d\tau\langle\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}^2}\rangle}$$

となり，分配関数は

$$Z[J,\tau]=N\int\mathcal{D}\bar{q}\exp\left[-\frac{1}{\hbar}\int_0^\tau d\tau\left\langle\left\{\frac{1}{4}\left(\dot{\bar{q}}+\frac{\delta\bar{S}}{\delta\bar{q}}\right)^2-\frac{\hbar}{2}\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}^2}+\bar{q}J\right\}\right\rangle\right]$$

の構造を持つ（E. ゴヂ，1983）．□

補足） 練習問題 4.8.2 で確かめたように，汎関数微分の行列式はグラスマン変数 $(\bar{\psi},\psi)$ を用いた積分で

$$\det\left[\frac{\delta\eta}{\delta\bar{q}}\right]\propto\int\mathcal{D}\bar{\psi}\mathcal{D}\psi e^{-\int_0^\tau d\tau\bar{\psi}\left(\partial_\tau+\frac{\delta^2\bar{S}}{\delta\bar{q}^2}\right)\psi}$$

---

*4) ここでの $\langle f\rangle$ 記号は，期待値ではなく $f(\tau,\bar{t})$ の $\bar{t}$ に関する積分の省略記号である．

と書くこともできる．この形を使って，$Z[J,\tau]$ を $(\bar{q},\bar{\psi},\psi)$ の汎関数積分として表した際の有効作用は，ボーズ変数 $\bar{q}$ とグラスマン変数 $(\bar{\psi},\psi)$ からなる超対称量子力学系の構造を持っている．ただし，源の J を通して観測量として取り出せるのは $\bar{q}$ のみであるので，この場合の超対称性は，**隠れた超対称性**と言うことになる．

付録 A
古典力学と正準力学

A.1 仮想仕事と最小作用の原理

3 次元空間にある質量 m の質点を考える．質点の位置を時間 t の関数である位置ベクトル $\boldsymbol{r}(t)$ で表すとき，質点に対するニュートンの運動方程式は粒子に働く外力を $\boldsymbol{F}$ として $\boldsymbol{F} = m\ddot{\boldsymbol{r}}$ と書ける．ここで，$\boldsymbol{F}^* \equiv -m\ddot{\boldsymbol{r}}$ も力（慣性抵抗）の要素と考えれば，運動方程式は力の釣合の方程式 $\boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^* = 0$ の形に書ける．この釣合の下で，粒子位置を $\delta\boldsymbol{r}$ 微小移動させたときの仮想仕事は，$(\boldsymbol{F} + \boldsymbol{F}^*)\cdot\delta\boldsymbol{r} = 0$ である．ただし，$\boldsymbol{F}$ に拘束力が含まれているなら拘束条件を満たす $\boldsymbol{r}(t)$ は次元数より少ない独立変数 $q_i(t)$ の関数であり，$\boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r}(q_i(t), t)$ と考えて $\delta\boldsymbol{r} = \sum_i \delta q_i \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i}$, $\dot{\boldsymbol{r}} = \sum_i \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial t}$, 従って $\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i} = \frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}}{\partial \dot{q}_i}$ のように扱わなくてはならない．この上で，0 となる仮想仕事は，

$$(\boldsymbol{F} - m\ddot{\boldsymbol{r}})\cdot\delta\boldsymbol{r} = 0 \tag{A.1}$$

である（ダランベールの原理）．ここで，(A.1) の第 2 項は，

$$\begin{aligned} m\sum_i \delta q_i \ddot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i} &= m\sum_i \delta q_i \left\{\frac{d}{dt}\left(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i}\right) - \dot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial q_i}\right)\right\} \\ &= m\sum_i \delta q_i \left\{\frac{d}{dt}\left(\dot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}}{\partial \dot{q}_i}\right) - \dot{\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}}{\partial q_i}\right\} \\ &= \sum_i \delta q_i \left\{\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial \dot{q}_i}\left(\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2\right) - \frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{m}{2}\dot{\boldsymbol{r}}^2\right)\right\} \end{aligned} \tag{A.2}$$

となる．一方，(A.1) の第 1 項は $\boldsymbol{F}\cdot\delta\boldsymbol{r} = \sum_i \delta q_i Q_i$ の形で一般化力 Q_i を与えるが，以下で仮定される保存力 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}) = -\nabla V(\boldsymbol{r})$ の場合には明らかに $Q_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i}$ となり，(A.1) は (A.2) と合わせてオイラー–ラグランジュの方程式

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad \left(L(q_i, \dot{q}_i) = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 - V(\boldsymbol{r})\right) \tag{A.3}$$

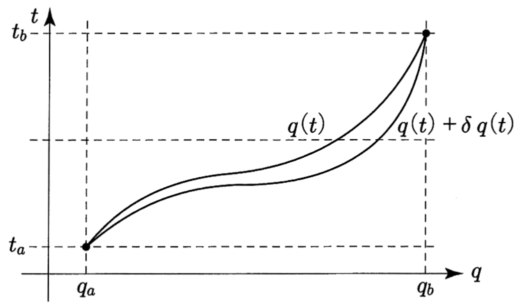


図 A.1　図は，共通の始点と終点を持つ二つの軌道，即ち古典軌道 q とこれからわずかにずれた軌道 $q+\delta q$ を表す．作用は q 上で極小値をとり，二つの軌道にわたる作用の差は δq の 1 次近似の範囲で 0 となる．

に帰着する．ここで L はラグランジアンと呼ばれ，考えている質点の場合，運動エネルギーと位置エネルギーの差の構造を持つ．粒子位置が $\boldsymbol{r}_a, (a=1,2,\cdots,N)$ で表される N 粒子系の場合も，$\sum_a(\boldsymbol{F}_a-m_a\ddot{\boldsymbol{r}}_a)\cdot\delta\boldsymbol{r}_a=0$ と拡張された仮想仕事の原理から，独立な自由度 $q_i, (i=1,2,\cdots,f\le 3N)$ で構成されるラグランジアン

$$L(q_i,\dot{q}_i)=\sum_a\frac{1}{2}m_a\dot{\boldsymbol{r}}_a^2-V(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots) \tag{A.4}$$

に対するオイラー–ラグランジュの方程式を導くことができる．

次に，時間 $t_a\le t\le t_b$ に亘って，オイラー–ラグランジュ方程式を満たす軌跡（古典軌道）に沿って条件 $\delta q_i(t_a)=\delta q_i(t_b)=0$ の下で (A.3) に δq_i を乗じて積分すると

$$0=\int_{t_a}^{t_b}dt\sum_i\delta q_i\left(\frac{\partial L}{\partial q_i}-\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right) \tag{A.5}$$

$$=\int_{t_a}^{t_b}dt\sum_i\left(\delta q_i\frac{\partial L}{\partial q_i}+\delta\dot{q}_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right)-\sum_i\left[\delta q_i\frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\right]_{t_a}^{t_b} \tag{A.6}$$

$$=\int_{t_a}^{t_b}dt\left\{L(q_i+\delta q_i,\dot{q}_i+\delta\dot{q}_i)-L(q_i,\dot{q}_i)\right\}. \tag{A.7}$$

従って，古典軌道に対応する $q_i(t)$ は，大域的に定義された作用（積分）

$$S[q]=\int_{t_a}^{t_b}dtL(q_i,\dot{q}_i) \tag{A.8}$$

の言葉で，作用の極小条件

$$\delta S[q]\equiv S[q+\delta q]-S[q]=0 \tag{A.9}$$

を満たす解として表現することができる（図 A.1）．$S[q]$ は，時間の関数 $q_i(t)$ の関数であり，この意味で $q_i(t)$ の汎関数と呼ばれ，また $\delta S[q]$ は汎関数の変分と呼ばれる．さらにこの変分を

$$\delta S[q] \equiv \int_{t_a}^{t_b} dt \sum_i \delta q_i(t) \frac{\delta S[q]}{\delta q_i(t)} \tag{A.10}$$

と書いて $S[q]$ の汎関数微分が定義されるが，(A.5), (A.9) より

$$\frac{\delta S[q]}{\delta q_i(t)} = \frac{\partial L}{\partial q_i(t)} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i(t)}\right) \tag{A.11}$$

であり，運動方程式 (A.3) を $\delta S[q]/\delta q_i(t) = 0$ と書くこともできる．

A.2 力学の正準形式

A.2.1 正準共役変数と正準運動方程式

オイラー–ラグランジュ方程式は，q_i の時間に関する 2 階微分方程式であるが，それぞれの q_i に正準共役な運動量

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad (i = 1, \cdots, f) \tag{A.12}$$

を導入し，$2f$ 次元の相空間 (q_i, p_i) における時間に関する 1 階の連立微分方程式に表すことができる．そのために，ルジャンドル変換

$$H(q,p) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}) \tag{A.13}$$

を実行し，ハミルトニアン $H(q,p)$ を定義する．H が実際に (q_i, p_i) を独立変数として持つことは，(A.3) より $d_q L = \sum_i dq_i \dot{p}_i$，および (A.12) より $d_{\dot{q}} L = \sum_i d\dot{q}_i p_i$ であることに注意して

$$dH = \sum_i (dp\dot{q}_i - dq_i \dot{p}_i) \tag{A.14}$$

から確かめられる．(A.14) からまた，正準変数 (q_i, p_i) に対する正準運動方程式と呼ばれる

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{および} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \tag{A.15}$$

が導かれる．さらに，ポアソン括弧と呼ばれる演算

$$\{f, g\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i}\frac{\partial g}{\partial q_i}\right) \tag{A.16}$$

を導入すれば，相空間上の任意関数 $A(q,p)$ の時間微分が，統一的な形

$$\begin{aligned} \frac{dA}{dt} &= \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial A}{\partial p_i}\dot{p}_i\right) \\ &= \{A, H\} \end{aligned} \tag{A.17}$$

に表される．(A.17) は，量子力学におけるハイゼンベルク運動方程式に対応す

るものであり，ポアソン括弧の特徴的な代数

$$\{A, B\} = -\{B, A\}, \tag{A.18}$$

$$\{A, B + C\} = \{A, B\} + \{A, C\}, \tag{A.19}$$

$$\{A, BC\} = \{A, B\}C + B\{A, C\}, \tag{A.20}$$

$$\{A, \{B, C\}\} + \{B, \{C, A\}\} + \{C, \{A, B\}\} = 0 \tag{A.21}$$

等は，$\{A, B\}$ を演算子の交換関係 $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ に置き換えて成立する量子力学の代数に対応する．これらの代数の中，(A.18)–(A.20) は，定義から簡単に確かめることができる．ヤコビの恒等式と呼ばれる (A.21) を確かめるために，特別な形の関数

$$e_a(q, p) = e^{i\sum_i (a_i q_i + \bar{a}_i p_i)} \tag{A.22}$$

のポアソン括弧を計算すると，

$$\{e_\beta, e_\gamma\} = -\beta * \gamma e_{\beta+\gamma}, \tag{A.23}$$

$$\{e_\alpha, \{e_\beta, e_\gamma\}\} = \beta * \gamma(\alpha * \beta + \alpha * \gamma) e_{\alpha+\beta+\gamma}, \tag{A.24}$$

ただし，

$$\beta * \gamma = -\gamma * \beta = \sum_i (\beta_i \bar{\gamma}_i - \bar{\beta}_i \gamma_i) \quad \text{etc.} \tag{A.25}$$

が得られる．容易に確かめられるように，(A.24) の α, β, γ を循環的に入れ替えて和をとると，(A.25) を考慮して 0 になる．一方，相空間上の任意関数は $A(q_i, p_i) \doteq A\left(\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial a_i}, \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial \bar{a}_i}\right) e_a|_{a,\bar{a}=0}$ と表せるから，結局，任意の関数に対しヤコビの恒等式 (A.21) が成立する．

A.2.2 グラスマン変数の正準力学

古典力学の正準形式では，正準変数は可換な古典変数であるが，ポアソン括弧を通して非可換構造が現れ，量子力学と密接に関連する構造を持つことになる．一方，3.3.1 節で導入されたグラスマン変数の力学系では，古典変数そのものが非可換性を持っているが，この場合も可換な正準変数の場合と同様に，正準力学系としての理論形式を確立することができる．

これを知るために，(3.60) で与えたフェルミ振動子のラグランジアン，あるいは $(\theta, \bar{\theta})$ の対称性を考慮して時間の部分積分を行った，

$$L_{\mathrm{F}}(\theta, \bar{\theta}) = \frac{i\hbar}{2}\left(\bar{\theta}\dot{\theta} - \dot{\bar{\theta}}\theta\right) - V(\theta, \bar{\theta}) \tag{A.26}$$

を基に考える．必要に応じて，$(\theta, \bar{\theta})$ を実数型のグラスマン変数

$$\theta = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\xi_1 + i\xi_2), \quad \bar{\theta} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\xi_1 - i\xi_2) \tag{A.27}$$

に書き換えると，上記の $L_{\rm F}$ は $L_{\rm F}=\frac{i}{2}\sum_{i=1}^{2}\xi_i\dot{\xi}_i-V_{\rm F}(\xi_i)$ となり，この形は任意個数の（実数型）グラスマン変数に拡張できる形なので，一般に

$$L_{\rm F}(\xi_i)=\frac{i}{2}\sum_{i=1}^{N}\xi_i\dot{\xi}_i-V_{\rm F}(\xi_i) \tag{A.28}$$

が（実数型）N-グラスマン変数系のラグランジアンと言うことになる．とくに，$N=2M$ の偶数のときは

$$\theta_i=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\xi_{2i-1}+i\xi_{2i}\right),\quad \bar{\theta}_i=\frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\xi_{2i-1}-i\xi_{2i}\right),\quad (i=1,2,\cdots,M) \tag{A.29}$$

とおけば，再び複素数型のグラスマン変数の系

$$\begin{aligned}L_{\rm F}(\theta_i,\bar{\theta}_i)&=\frac{i\hbar}{2}\sum_{i=1}^{M}\left(\bar{\theta}_i\dot{\theta}_i-\dot{\bar{\theta}}_i\theta_i\right)-V_{\rm F}(\theta_i,\bar{\theta}_i)\\&\approx i\hbar\sum_{i=1}^{M}\bar{\theta}_i\dot{\theta}_i-V_{\rm F}(\theta_i,\bar{\theta}_i)\end{aligned} \tag{A.30}$$

に戻すことができる．ここで $\approx$ は，時間の完全微分の差を無視して同一視する等号とした．この形から，$\pi_i=\frac{\partial}{\partial\dot{\theta}_i}L_{\rm F}=-i\hbar\bar{\theta}_i$ となり，ルジャンドル変換により古典変数のハミルトン形式に対応する

$$H_{\rm F}(\theta_i,\pi_i)=\sum_{i=1}^{M}\dot{\theta}_i\pi_i-L_{\rm F}(\theta_i,\bar{\theta}_i) \tag{A.31}$$

を導入することもできる．簡単な，(3.60) の例で言えば，

$$H_{\rm F}=\hbar\omega\left(\bar{\theta}\theta-\frac{1}{2}\right)=i\omega\pi\theta-\frac{\hbar\omega}{2} \tag{A.32}$$

である．この系の運動方程式は，最小作用の原理 $\delta\int dtL_{\rm F}=\int dt\left\{\hbar\delta\bar{\theta}(i\dot{\theta}-\omega\theta)+\hbar\delta\theta(i\dot{\bar{\theta}}+\omega\bar{\theta})\right\}=0$ から，$\bar{\theta}\equiv\frac{i}{\hbar}\pi$ として

$$\dot{\theta}=-i\omega\theta=-\frac{\partial}{\partial\pi}H_{\rm F}, \tag{A.33}$$

$$\dot{\pi}=i\omega\pi=-\frac{\partial}{\partial\theta}H_{\rm F} \tag{A.34}$$

となる．結果は，古典正準変数の $\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p},\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}$ と異なり，$H_{\rm F}$ の微分は同符号となっている．これをポアソン括弧で書くとすれば，

$$\begin{aligned}\dot{\theta}&=\{\theta,H_{\rm F}\}=-\left(\frac{\partial\theta}{\partial\theta}\frac{\partial H_{\rm F}}{\partial\pi}+\frac{\partial H_{\rm F}}{\partial\theta}\frac{\partial\theta}{\partial\pi}\right),\\\dot{\pi}&=\{\pi,H_{\rm F}\}=-\left(\frac{\partial\pi}{\partial\theta}\frac{\partial H_{\rm F}}{\partial\pi}+\frac{\partial H_{\rm F}}{\partial\theta}\frac{\partial\pi}{\partial\pi}\right)\end{aligned} \tag{A.35}$$

である．一般に，多変数のグラスマン変数の関数 $A(\theta_i,\pi_i)$ が，定数のグラスマン変数 ϵ との積の下で $A\epsilon=(-1)^{[A]}\epsilon A$, $([A]=0,1)$ を満たすとき $[A]$ を A

のグラスマン・パリティとし，$[A]=0$ のとき偶パリティ，$[A]=1$ のとき奇パリティと呼ぶ．(A.35) は，偶パリティの E と奇パリティの O に対し，

$$\{O,E\} \equiv -\{E,O\} = -\sum_i \left(\frac{\partial O}{\partial \theta_i}\frac{\partial E}{\partial \pi_i} + \frac{\partial E}{\partial \theta_i}\frac{\partial O}{\partial \pi_i} \right) \tag{A.36}$$

と定義することを示唆する．また，$E = \epsilon O'$, $([O'] = 1)$ であるとすれば，$\{O,E\} = \{O,\epsilon O'\} \equiv -\epsilon\{O,O'\}$ により，奇パリティの変数同士のポアソン括弧を定義することができ，

$$\{O,O'\} \equiv \{O',O\} = -\sum_i \left(\frac{\partial O}{\partial \theta_i}\frac{\partial O'}{\partial \pi_i} + \frac{\partial O'}{\partial \theta_i}\frac{\partial O}{\partial \pi_i} \right) \tag{A.37}$$

を得る．同様に，(A.36) で $O = \epsilon E'$, $([E'] = 0)$ と置き，$\{O,E\} = \{\epsilon E', E\} \equiv \epsilon\{E',E\}$ と定義すれば，偶パリティの変数同士のポアソン括弧が

$$\{E',E\} \equiv -\{E',E\} = \sum_i \left(\frac{\partial E'}{\partial \theta_i}\frac{\partial E}{\partial \pi_i} - \frac{\partial E}{\partial \theta_i}\frac{\partial E'}{\partial \pi_i} \right) \tag{A.38}$$

の形に定められる．以上をまとめて，ポアソン括弧と運動方程式を

$$\{A,B\} \equiv -(-1)^{[A][B]}\{B,A\} \tag{A.39}$$

$$= -(-1)^{([A]+1)([B]+1)} \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial \theta_i}\frac{\partial B}{\partial \pi_i} + \frac{\partial A}{\partial \pi_i}\frac{\partial B}{\partial \theta_i} \right), \tag{A.40}$$

$$\frac{d}{dt}A(\theta,\pi) = \{A(\theta,\pi), H_{\mathrm{F}}(\theta,\pi)\} \tag{A.41}$$

と書くことができる．可換な正準変数のポアソン括弧と同様に，グラスマン変数のポアソン括弧の定義から，ヤコビの恒等式を含めた代数的性質が確かめられる[34]．以上は，グラスマン変数のみを含む系の正準形式であるが，可換な正準変数とグラスマン変数の混在する系にもポアソン括弧を拡張し，正準形式を確立することが可能である．

A.2.3 ハミルトン–ヤコビ方程式

運動方程式を満たす経路に沿って定義された作用と，正準変数の関係を調べる．まず，(A.13) を考慮して作用を相空間上での積分形

$$S = \int_a^b \left(\sum_i dq_i p_i - dt H(q,p) \right) \tag{A.42}$$

に表し，t まで変化させた変分を計算すると

$$\delta S = \int_a^b \sum_i \left\{ \delta p_i \left(dq_i - dt\frac{\partial H}{\partial p_i} \right) - \delta q_i \left(dp_i + dt\frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \right\} + \left[\sum \delta q_i p_i - \delta t H \right]_a^b . \tag{A.43}$$

従って，積分経路の始点 (a) を固定 $(\delta q_i|_a = \delta t|_a = 0)$ し，a から b に至る経

路の途中で運動方程式 (A.15) が成り立つとすれば，

$$\frac{\partial S}{\partial q_i} = p_i \,, \tag{A.44}$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -H(q,p) = -H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) \tag{A.45}$$

が成立する．ただし，上端の変数 (t_b, q_{ib}) を改めて (t, q_i) と記した．(A.45) は，ハミルトンの主関数と呼ばれる S に関するハミルトン–ヤコビの方程式である．とくに系のエネルギーが保存する系では，変数分離によりハミルトン–ヤコビの方程式は

$$S(t,q) = -Et + S_E(q), \quad (E = \text{const.})\,, \tag{A.46}$$

$$p_i = \frac{\partial S_E}{\partial q_i}\,, \tag{A.47}$$

$$E = H\left(q, \frac{\partial S_E}{\partial q}\right) \tag{A.48}$$

の形になる．ここで，S_E はハミルトンの特性関数と呼ばれ，粒子の運動量は (A.47) により $S_E =$ 一定 の超曲面への法線の意味を持つ．こうして，古典力学の粒子の運動に対し，幾何光学の波面の伝播に類似した描像を描くことができる．

さて，独立変数 q_i の数が n であれば，(A.48) の完全解は積分定数 $\alpha_i, (i = 1, \cdots, n)$ を含む形 $S_E(q, \alpha)$ に求まる．そこで，改めて $\alpha_i \equiv P_i$, $E = K(P)$ と書き $Q_i = \frac{\partial S_E}{\partial P_i}$ を導入すれば，(A.42) は

$$S = \int_a^b \{dS_E - \sum_i Q_i dP_i - K(P)dt\} \tag{A.49}$$

となる．このとき，dS_E は完全微分項のため S の変分に基づく運動方程式には影響せず，

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \equiv \nu_i \; (= \text{const.})\,, \tag{A.50}$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \tag{A.51}$$

が導かれる．この形は，$K(P)$ をハミルトニアンとする正準運動方程式であり，(Q, P) は S_E を母関数として (q, p) から正準変換で得られた正準変数の意味を持つ．このとき，とくに (A.50) より

$$Q_i = \nu_i t + \beta_i, \quad (\nu_i \equiv \dot{Q}_i, \beta_i \equiv Q_i) \tag{A.52}$$

である．次に，保存系に加えて，それぞれの (q_i, p_i) が独立な周期運動を行い，ハミルトン–ヤコビ方程式が変数分離型になり，ハミルトンの特性関数として $S_E(q, P) = \sum_i S_E^{(i)}(q_i, P)$ が解となる場合を考える．このとき，

$$J_i = \oint p_i dq_i, \quad \left(p_i = \frac{\partial S_E^{(i)}}{\partial q_i} \right) \tag{A.53}$$

により，i 番目の自由度の**作用変数** J_i を定義し，積分定数 P_i を J_i に同一視する．これに合わせて，P_i に正準共役な Q_i を改めて $w_i = \frac{\partial S_E}{\partial J_i} (= \nu_i t + \beta_i)$ と書き，**角変数**と呼ぶ．さて，$q_j, (j \neq i)$ を固定して q_i のみを周期的に一巡させると，角変数 w_j の変化は

$$\Delta_i w_j = \oint \frac{\partial w_j}{\partial q_i} dq_i = \oint \frac{\partial S_E}{\partial J_j \partial q_i} dq_i = \frac{\partial}{\partial J_j} \oint p_i dq_i = \delta_{ij} \tag{A.54}$$

となり，i 番目の自由度の周期を T_i とすると $\Delta_i w_i = \nu_i T_i = 1$ を得て，ν_i が $q_j, (j \neq i)$ を固定した周期運動の振動数の意味を持つ．運動の 1 周期に角変数が 1 だけ変化することから，$q_i(t)$ は，フーリエ級数

$$q_i(t)\big|_{q_j:\text{固定}} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} q_i(l) e^{2\pi i l w_i} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \bar{q}_i(l) e^{2\pi i l \nu_i t}, \tag{A.55}$$

($\bar{q}_i(l) = q_i(l) e^{2\pi i l \beta_i}$) に展開される．一般の相空間上の $A(q,p)$ も，変数分離された自由度の関数として表すことができ，フーリエ級数展開

$$A = \sum_{l_1=-\infty}^{\infty} \cdots \sum_{l_n=-\infty}^{\infty} A(l_1, \cdots, l_n) e^{2\pi i (l_1 w_1 + \cdots + l_n w_n)} \tag{A.56}$$

が可能になる．周期運動を行う系の，作用変数，各変数，およびその性質に基づくフーリエ展開表示は，前期量子論を構築する段階で大きな役割を果した．

A.3 拘束条件を持つ力学系

力学系を正準形式で記述する際に，系の対称性に関連した拘束条件が現れる場合がある．例として，2 次元平面上の回転子のラグランジアン

$$L = \frac{1}{2} I \omega^2, \quad \left(\omega = \frac{x_1 \dot{x}_2 - x_2 \dot{x}_1}{r^2}, \ r^2 = x_1^2 + x_2^2 \right) \tag{A.57}$$

を考える．ここで，ω は回転の角運動量を，また $I(= \text{const.})$ は慣性能率を表す．定義より，x_i に正準共役な運動量が $p_1 = -I\omega x_2 / r^2, p_2 = I\omega x_1 / r^2$ となることから，正準変数による記述に移ると

$$H = \frac{1}{2I} M^2, \ (M = x_1 p_2 - x_2 p_1), \tag{A.58}$$

$$\phi \equiv x_1 p_1 + x_2 p_2 = 0, \tag{A.59}$$

$$\dot{\phi} = \{\phi, H\} = 0 \tag{A.60}$$

の諸関係が生じる．ここで，H は回転子のハミルトニアンを，$\phi = 0$ は正準変数の拘束条件を，また (A.60) は ϕ が保存量であることを表す．一般に，相空

間上の関数 $G(q,p)$ による正準変数の無限小パラメーター ϵ による変換を

$$\delta q_i = \epsilon\{G, q_i\} = -\epsilon\frac{\partial G}{\partial p_i}\ ,\quad \delta p_i = \epsilon\{G, p_i\} = \epsilon\frac{\partial G}{\partial q_i} \tag{A.61}$$

で定義する．このとき，任意関数 $A(q,p)$ の無限小変換は

$$\delta A = \sum_i \left(\delta q_i \frac{\partial A}{\partial q_i} + \delta p_i \frac{\partial A}{\partial p_i}\right) = \epsilon\{G, A\} \tag{A.62}$$

と書ける．とくに A がハミルトニアン H である場合は $\delta H = \epsilon\{G, H\} = \epsilon\dot{G}$ となり，保存量 $\dot{G} = 0$ はハミルトニアンを不変とする変換 $\delta H = 0$ と結び付く（**ネーターの定理**）．(A.60) は，ϕ が引き起こすスケール変換 $\delta x_i = -\epsilon x_i, \delta p_i = \epsilon p_i$ の下でハミルトニアンが不変になることに結び付いた，保存量の例となっている．このような拘束条件の付いた相空間では，時間発展を与えるハミルトニアンの定義は一意的ではなく，λ を任意関数として

$$H_\lambda = H + \lambda\phi \tag{A.63}$$

の任意性があり，λ の選択に応じて時間の意味が定まることになる．なお，拘束条件を使った等式を $\approx$ と記すことにすれば，$H \approx H_\lambda$ である．

次に，ラグランジアンからハミルトニアン H と共に拘束条件 $\phi_i = 0, (i = 1, 2, \cdots, r)$ が導かれ，任意性を考慮したハミルトニアンを

$$H_\lambda = H + \sum_j \lambda_j \phi_j \tag{A.64}$$

と与える．このとき，H_λ による時間発展により

$$\dot{\phi}_i \approx \{\phi_i, H\} + \sum_j \{\phi_i, \phi_j\}\lambda_j \tag{A.65}$$

となる．拘束条件を満たす相空間の部分空間が時間発展により不変であるためには，何らかの意味で $\dot{\phi}_i \approx 0$ でなくてはならない．

そこでまず，反対称行列 $\Delta = [\{\phi_i, \phi_j\}]$ の行列式が $\det\Delta \neq 0$ であり，逆行列 Δ^{-1} を持つ場合を考える．拘束条件がこの性質を持つとき（**第 2 類**の拘束条件），$\lambda_i = -\sum_j (\Delta^{-1})_{ij}\{\phi_j, H\}$ と置けば $\dot{\phi} \approx 0$ が満たされ，任意関数の時間発展は，

$$\dot{A} \approx \{A, H\}_\mathrm{D} \equiv \{A, H\} - \{A, \phi_i\}(\Delta^{-1})_{ij}\{\phi_j, H\} \tag{A.66}$$

で定義できる．$\{A, B\}_\mathrm{D}$ はディラック括弧と呼ばれ，$\{\phi_i, \phi_j\}_\mathrm{D} = 0$ を満たす．

次に，拘束条件が

$$\{\phi_i, H\} = \sum_j c_{ij}\phi_j\ , \tag{A.67}$$

$$\{\phi_i, \phi_j\} = \sum_k {c_{ij}}^k \phi_k \tag{A.68}$$

を満たす場合（**第1類**の拘束条件）を考える．実際には，$\dot{\phi}_i \approx 0$ が新しい拘束条件を導くことがあり，それらを加えた全体に対し上の関係が成立しているものとする．ここで (A.68) は，ϕ_i の引き起こす変換が構造定数 ${c_{ij}}^k$ のリー群の構造を持つことを表し，この意味で $\phi_i = 0$ は**ゲージ条件**とも呼ばれる．

このとき，(A.64) による時間発展の不定性を除くために，付加的な**ゲージ固定条件** $\chi_i = 0, (i = 1, 2, \cdots, r)$ をおく．ただし，

$$\{\chi_i, \chi_j\} = 0\ , \quad \det K \neq 0, \ (K = [\{\chi_i, \phi_j\}]) \tag{A.69}$$

を要求する．この場合，$\dot{\chi}_i \approx 0$ は $\lambda_j = -\sum_k (K^{-1})_{jk}\{\chi_k, H\}$ と置くことにより満たされ，任意関数の時間発展は

$$\dot{A} \approx \{A, H\} - \sum_{j,k}\{A, \phi_j\}(K^{-1})_{jk}\{\chi_k, H\} \tag{A.70}$$

で定義できる．このとき，$\dot{\chi}_i \approx 0, \dot{\phi}_i \approx 0$ が成立し，拘束条件を満たす物理的な部分空間は不変になる．

現実の問題では，第1類と第2類が混在した拘束条件の系を扱う場合も生じるが，上の様な手順により拘束条件を扱うことは，その場合でも有効である．

付録 B
確率過程と確率微分方程式

ブラウン運動は，時刻 $t(\in T)$ の粒子位置 $X(t)$ が不規則な外力によりある確率分布（ガウス分布）に従って変動する現象である．一般に，パラメーター t に依存し，特定の確率分布に従って変動する確率変数 $\{X(t), t \in T\}$ を確率過程と呼ぶ．t は離散値であってもよく，時間でなくても構わないが，以下では確率過程として物理的なブラウン運動を想定し，t を連続的な時間パラメーターと考える．

B.1 ウィーナー過程

ブラウン運動の数学的モデルであるウィーナー過程 $X(t)$ は，初期条件 $X(0) = 0$ を満たし，時間間隔 $0 = t_0 < t_1 < t_2 < \cdots < t_N = T$ に対して $X(t_i) - X(t_{i-1}), (i = 1, 2, \cdots, N)$ が独立な確率変数で*1)，期待値 $\mu\Delta t_i$，分散 $\sigma^2\Delta t_i$, $(\Delta t_i = t_i - t_{i-1})$ のガウス型の確率分布に従う．とくに，$\mu = 0, \sigma = 1$ の場合は標準ブラウン運動と呼ばれ，確率過程をウィーナーの頭文字を用いて $W(t)$ の記号で表す．従って $W(t)$ の満たすべき性質は，$\Delta W(t_i) = W(t_i) - W(t_{i-1})$ として，

$$\langle \Delta W(t_i) \rangle = 0, \quad \langle \Delta W(t_i) \Delta W(t_j) \rangle = \delta_{ij} \Delta t_i \tag{B.1}$$

である．ここで，$\langle \cdots \rangle$ は量子力学の場合と同様に確率変数の期待値を表す．時間を離散的な $t_i, (i = 0, 1, 2, \cdots, N)$ に制限すると，独立な $\{\Delta W(t_i)\}$ の標本値 $\{\Delta w_i\}$ に関する分布関数はガウス分布関数の積

$$\rho(\Delta \boldsymbol{w}) = \prod_{i=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta t_i}} e^{-\frac{1}{2}\frac{\Delta w_i^2}{\Delta t_i}} \tag{B.2}$$

であり，(B.1) は期待値 $\langle (\cdots) \rangle = \int (\prod_i d\Delta w_i)(\cdots)\rho(\Delta \boldsymbol{w})$ の意味で満たされ

*1) このような $X(t)$ は，加法過程と呼ばれる．

る．ところで，上記の分布関数の指数部が $-\frac{1}{2}\sum_i \Delta t_i \left(\frac{\Delta w_i}{\Delta ti}\right)^2$ と書けることから，T を固定して形式的に $N \to \infty$ の極限をとると和は積分形となり，考えている期待値は

$$\int \mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{2}\int_0^T dt\eta(t)^2} = 1 \tag{B.3}$$

により規格化された汎関数積分を用いて

$$\langle(\cdots)\rangle = \int \mathcal{D}\eta(\cdots)e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^T dt\eta(t)^2} \tag{B.4}$$

と表せることになる．ここで，$\eta(t)$ は，関係

$$\frac{dW(t)}{dt} = \eta(t), \quad \left(W(t) = \int_0^t dt'\eta(t') \right) \tag{B.5}$$

を満たす確率変数で，白色ノイズと呼ばれる．

上の極限操作は，それ自体を意味づけるより (B.3), (B.4) を定義と考えればよい．この時，汎関数積分の部分積分と $\frac{\delta\eta(t')}{\delta\eta(t'')} = \delta(t' - t'')$ から，

$$\langle\eta(t)\rangle = 0, \ \text{(奇関数の積分の意味で自明)}, \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}\langle\eta(t)\eta(t')\rangle &= \int \mathcal{D}\eta\eta(t)\left(-\frac{\delta}{\delta\eta(t')}\right)e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^T ds\eta(s)^2} \\ &= \int \mathcal{D}\eta\frac{\delta\eta(t)}{\delta\eta(t')}e^{-\frac{1}{2}\int_0^T ds\eta(s)^2} = \delta(t-t')\end{aligned} \tag{B.7}$$

等の性質がある．(B.5) における t は連続値を考えているが，離散区間の $\Delta W(t_i)$, $(i = 1, 2, \cdots, N)$ にもそのまま適用することができ，(B.1) の第 1 式は (B.6) から自明であり，第 2 式も

$$\begin{aligned}\langle\Delta W(t_i)\Delta W(t_j)\rangle &= \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt \int_{t_{j-1}}^{t_j} dt' \langle\eta(t)\eta(t')\rangle \\ &= \int_{t_{i-1}}^{t_i} dt \int_{t_{j-1}}^{t_j} dt' \delta(t-t') \\ &= \delta_{ij}\Delta t_i\end{aligned}$$

と確かめられる．

さて，白色ノイズの期待値を用いると，ウィーナー過程 $W(t)$ の任意関数 $f(W(t))$ の期待値が，

$$\langle f(W(t))\rangle = \left\langle \int dwf(w)\delta(w - W(t)) \right\rangle = \int dwf(w)\rho(w,t)\,, \tag{B.8}$$

ただし，

$$\rho(w,t) = \langle\delta(w - W(t))\rangle \tag{B.9}$$

と表される．ここで $\rho(w,t)$ は，$W(t)$ の標本値 w に関する確率密度の意味を持

ち，明らかに初期条件 $\rho(w,0)=\delta(w)$ と，全確率 $\int dw\rho(w,t)=1$ を満たす．(B.9) を基に, (B.4) から $\rho(w,t)$ の具体的な形を容易に求めることもできる．一般性を持たせるため，初期値 $X(t_0)=x_0$，分散 $\langle\Delta X(t_i)\Delta X(t_j)\rangle=2D\delta_{ij}\Delta t_i$ の（一様正規加法）過程

$$X(t)=x_0+\sqrt{2D}\int_{t_0}^{t}dt'\eta(t') \tag{B.10}$$

で考えると，対応する $\rho(x,t)$ は D を拡散係数とする（遷移）確率密度

$$\begin{aligned}\langle\delta(x-X(t))\rangle &= \int\mathcal{D}\eta\left[\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik\{x-x_0-\sqrt{2D}\int_{t_0}^{t}dt'\eta(t')\}}\right]e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^{T}dt'\eta(t')^2}\\ &=\int\frac{dk}{2\pi}e^{ik(x-x_0)-(t-t_0)Dk^2}\int\mathcal{D}\eta e^{-\frac{1}{2}\int_{t_0}^{T}\left[\eta(t)-i\theta(t-t')\sqrt{2D}k\right]^2}\\ &=\frac{1}{\sqrt{4\pi D(t-t_0)}}e^{-\frac{1}{4D}\frac{(x-x_0)^2}{t-t_0}}\end{aligned} \tag{B.11}$$

の形に求まる．

B.1.1 確率微分方程式

連続極限の形式 (B.5) により厳密な意味を与えるために，ウィーナー過程の定義式 (B.1) に戻って，Δt_i を無限小に近づけることを考える．この時，(B.1) の第 2 式は平均自乗極限*2) の意味で収束する形であり，期待値の記号を外して極限を表すことにする．また $\Delta W(t)\Delta t$ 等は Δt に比べて高次の無限小であり，極限は 0 とおく．すると，$\Delta t\to dt$ の 1 次までを残す無限小量の代数は

$$dt^2=dtdW(t)=dW(t)dt=0,\quad dW(t)^2=dt \tag{B.12}$$

となる．このような無限小代数*3) を満たすウィーナー過程 $W(t)$ から，

$$\begin{aligned}dX(t)&=X(t+dt)-X(t)\\ &=\mu(X(t),t)dt+\sigma(X(t),t)dW(t)\end{aligned} \tag{B.13}$$

を通して新しい確率過程 $X(t)$ を定義することもできる．この場合の $X(t)$ の無限小代数の構造は，(B.12) から

$$dX(t)^2=\sigma(X(t),t)^2dt \tag{B.14}$$

である．数学的厳密さにこだわらず，これらの無限小代数を満たす微分項の等式を形式的に dt で割って白色ノイズで表した関係

$$\frac{dX(t)}{dt}=\mu(X(t),t)+\sigma(X(t),t)\eta(t) \tag{B.15}$$

---

*2) $\lim_{a\to b}X_a=X_b\Leftrightarrow\lim_{a\to b}\langle(X_a-X_b)^2\rangle=0$.

*3) 伊藤微分と呼ばれる．

が，確率微分方程式の別表現であり，物理でランジュバン方程式と呼ばれている方程式に対応する．歴史的には，$X(t)$ を粒子速度 $v(t)$ に対応させ，μ, σ を $\mu(v(t)) = -\frac{\gamma}{m}v(t)$ および $\sigma = \sqrt{2D}/m$,（D, γ, m : 定数）として，(B.15) を

$$m\frac{dv(t)}{dt} = -\gamma v(t) + \sqrt{2D}\bar{\eta}(t) \tag{B.16}$$

と表した形が，質量 m の粒子が抵抗係数 γ の媒質の中で搖動力 $\sqrt{2D}\bar{\eta}(t)$ を受けるブラウン運動の模型として，ランジュバン (1908) により提案された方程式である．この場合，搖動力は (B.11) と同じ手順で分散 $2D\Delta t$ のガウス分布を生じる．従って，(B.16) で抵抗係数が $\gamma \to 0$ の極限では，速度分布が分散 $2D\Delta t/m^2$ のガウス分布に近づくことになる．一方，粘性抵抗が慣性力に比べて十分大きければ (B.16) 式の左辺を無視することができ，粒子位置 $x(t)$ に対して確率微分方程式

$$\gamma\frac{dx(t)}{dt} = \sqrt{2D}\eta(t), \quad \left(\frac{dx(t)}{dt} = v(t)\right) \tag{B.17}$$

が成立して，$x(t)$ 自身が分散 $2D\Delta t/\gamma^2$ のガウス分布に従うことになる．

B.2　マルコフ過程とフォッカー–プランク方程式

初期条件 $X(s) =$ を満たす確率過程 $X(t), (t \geq s)$ の標本が，微小区間 Δx に見出される確率を

$$\Pr(\Delta x, t|y, s) = \Delta x P(x, t|y, s) \tag{B.18}$$

と表し，遷移確率密度 $P(x, t|y, s)$ を導入する．一般には，このような遷移確率密度は時刻 s 以前の経過履歴に依存するが，依存性の無い場合に確率過程がマルコフ性を持つといい，ウィーナー過程もこの性質を持つ．さて，遷移 $y \to \Delta x$ の過程で，$X(u), (s < u < t)$ が区間 Δz を経過するという条件がある場合，独立事象の確率の積として

$$\Pr(\Delta x, t|y, s)|_{\Delta z, u} = \Delta x P(x, t|z, u) \times \Delta z P(z, u|y, s) \tag{B.19}$$

により遷移の確率が与えられる．ここで，Δz を全ての領域に亘って足し上げると，結果は経過条件のない (B.18) に戻ることになり，遷移確率密度に対するチャップマン–コルモゴロフの方程式

$$P(x, t|y, s) = \int dz P(x, t|z, u) P(z, u|y, s) \tag{B.20}$$

が導かれる．遷移確率密度は，定義により $P(x, t|y, s) \geq 1$ および $\int dx P(x, t|y, s) = 1$ であり，(B.20) が $t \to s$ の極限で成立するために初期条件

$$\lim_{t \to s} P(x, t|y, s) = \delta(x - y) \tag{B.21}$$

を満たさなくてはならない．また，無限遠方で遷移確率密度がなめらかに 0 に近づくように，境界条件

$$\lim_{|x| \to \infty} \left(\frac{\partial}{\partial x}\right)^n P(x, t|y, s) = 0, \quad (n = 0, 1) \tag{B.22}$$

が要求される．

さて，$P(x, t|y, s)$ は初期条件 (B.21) の下で時間発展をした確率過程 $X(t)$ の時刻 t での確率分布であり，これを用いて任意関数 $R(X(t))$ の期待値を

$$\langle R(X(t)) \rangle = \int dx R(x) P(x, t|y, s) \tag{B.23}$$

と表す．ここで確率過程 $X(t)$ の無限小代数 (B.13), (B.14) を考慮し，$dR(X(t)) = R(X(t + dt)) - R(X(t)) = R(X(t) + dX(t)) - R(X(t))$ を dt の 1 次，従って $dX(t)$ の 2 次まで展開すると，

$$\begin{aligned} dR(X(t)) = R'(X(t)) \{\mu(X(t), t)dt + \sigma(X(t), t)dW\} \\ + \frac{1}{2} R''(X(t))\sigma(X(t), t)^2 dt \end{aligned} \tag{B.24}$$

となる．この上で，$X(t)$ と $dW(t) = W(t + dt) - W(t)$ が独立な確率変数であり $\langle f(X(t))dW(t)\rangle = \langle f(X(t))\rangle\langle dW(t)\rangle = 0$ となることに注意して，

$$d\langle R(X(t))\rangle = dt \int dx \left\{ R'(x)\mu(x, t) + \frac{1}{2} R''(x)\sigma(x, t)^2 \right\} P(x, t|y, s) \tag{B.25}$$

を得る．この式を dt で割り，境界条件 (B.22) の下で部分積分を繰り返すと，

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\langle R(X(t))\rangle &= \int dx R(x) \frac{\partial}{\partial t} P(x, t|y, s) \\ &= \int dx R(x) \left\{ -\frac{\partial}{\partial x}\big(\mu(x, t)P(x, t|y, s)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\big(\sigma(x, t)^2 P(x, t|y, s)\big) \right\}. \end{aligned}$$

最後に R の任意性を考慮して，フォッカー–プランクの方程式

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t|y, s) = -\frac{\partial}{\partial x}\{\mu(x, t)P(x, t|y, s)\} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\{\sigma(x, t)^2 P(x, t|y, s)\} \tag{B.26}$$

が導かれる．

B.3 白色ノイズと遷移の確率密度

白色ノイズ $\eta(t)$ を用いると，(B.9) と同じ考え方で遷移確率密度を具体的に書き下すことができる．まず，初期条件 $X(s) = y$ の下で，確率微分方程式

(B.15) を解いて得られた解を $X_s(t), (s \le t)$ とする．$X_s(t)$ は外力としての白色ノイズを通して確率変数となり，(B.23) の期待値をその確率分布による期待値と考えることができる．そこで，

$$\langle R(X_s(t))\rangle = \int dx R(x)\langle\delta(x - X_s(t))\rangle \tag{B.27}$$

と書き換え，$\langle\cdots\rangle$ を確率微分方程式 (B.15) に含まれる白色ノイズ $\eta(t)$ に対する期待値と考えて，

$$P(x, t|y, s) = \langle\delta(x - X_s(t))\rangle \tag{B.28}$$

と定義できる．上式の右辺は，y を初期位置としてブラウン運動を行った結果 x に至るという条件を書き下した関係で，明確な物理的意味を持っている．また，(B.28) が遷移確率密度の満たすべき性質 $\int dx P(x, t|y, s) = 1$ および $\lim_{t\to s} P(x, t|y, s) = \delta(x - y)$ を持つことも，明らかである．さらに，確率微分方程式の解を初期位置も明示して $X_s(t) = X(t; s, y)$ と書くなら，$s < u < t$ に対して $X(t; s, y) = X(t; u, X(u; s, y))$ であるから，

$$\int dz\delta(x - X(t; u, z))\delta(z - X(u; s, y)) = \delta(x - X(t; s, y)) \tag{B.29}$$

を得て，マルコフ性も確かめられる．

次に，(B.13) を $X_s(t + \Delta t) = X_s(t) + \Delta X_s(t)$ の形で使って，$\Delta X_s(t)$ の 2 次まで展開すると

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\delta(x - X_s(t)) &= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left[\delta(x - X_s(t + \Delta t)) - \delta(x - X_s(t))\right] \\
&= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\left[-\Delta X_s(t)\delta'(x - X_s(t)) + \frac{1}{2}\Delta X_s(t)^2\delta''\delta(x - X_s(t))\right] \\
&= \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\Big[-\{\mu(X_s(t), t)\Delta t + \sigma(X_s(t), t)\Delta W(t)\}\delta'(x - X_s(t)) \\
&\qquad\qquad + \frac{1}{2}\Delta W(t)^2\delta''\delta(x - X_s(t))\Big]
\end{aligned} \tag{B.30}$$

となる．ここで，$\Delta W(t)$ と $X_s(t)$ が独立な確率変数であることに注意し，上式の白色ノイズによる期待値をとると，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\langle\delta(x - X_s(t))\rangle &= -\langle\mu(X_s(t), t)\delta'(x - X_s(t))\rangle \\
&\qquad + \frac{1}{2}\langle\sigma(X_s(t), t)^2\delta''(x - X_s(t))\rangle \\
&= -\frac{\partial}{\partial x}\left[\mu(x, t)\langle\delta(x - X_s(t))\rangle\right] + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[\sigma(x, t)^2\langle\delta(x - X_s(t))\rangle\right].
\end{aligned} \tag{B.31}$$

得られた結果は，フォッカー–プランクの方程式 (B.26) に他ならない．

(B.28) は有用な表式で，この形から s に関する微分方程式を導くこともでき

る．まず，$X_s(t)$ が積分方程式

$$X_s(t) = y + \int_s^t d\tau \{\mu(X_s(\tau), \tau) + \sigma(X_s(\tau), \tau)\eta(\tau)\} \tag{B.32}$$

の解であり，とくに

$$\Delta_* X_s(t) \equiv X_{s-\Delta s}(t) - X_s(t) = [\mu(y, s) + \sigma(y, s)\eta(s)]\Delta s \tag{B.33}$$

と書けることに注意すると，

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial s}\langle \delta(s - X_s(t)) \rangle &= \lim_{\Delta s \to 0} \frac{1}{\Delta s} \langle \delta(x - X_s(t)) - \delta(x - X_{s-\Delta s}(t)) \rangle \\
&= \lim_{\Delta s \to 0} \frac{1}{\Delta s} \langle \Delta_* X_s(t) \delta'(x - X_s(t)) - \frac{1}{2} \Delta_* X_s(t)^2 \delta''(x - X_s(t)) \rangle \\
&= -\mu(y, s) \frac{\partial}{\partial y} \langle \delta(x - X_s(t)) \rangle - \frac{1}{2} \sigma(y, s)^2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \langle \delta(x - X_s(t)) \rangle
\end{aligned} \tag{B.34}$$

が得られる．あるいは，遷移の確率密度で書き直すと，

$$\frac{\partial}{\partial s} P(x, t|y, s) = -\mu(y, s) \frac{\partial}{\partial x} \{P(x, t|y, s)\} - \frac{1}{2} \sigma(y, s)^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \{P(x, t|y, s)\} \tag{B.35}$$

である．これもフォッカー–プランク方程式の一つであり，(B.26) を**前向き**，また (B.35) を**後ろ向き**と呼んで区別する．

付録 C
ゲルファントの三つ組

量子力学において，「実数の値を持つ物理量はエルミート演算子で表され，その異なる固有値に属する固有状態は直交系を作る」と言う立場は，現実的な多くの問題で有用であるものの，演算子の定義域や状態空間の位相を曖昧にしているため，問題に応じて数学的に慎重な扱いが必要になる場合がある．以下では，量子力学系の状態空間を無理なく表現するためにゲルファントにより確立された三つ組（Rigged ヒルベルト空間）について，その概略を述べる*1)．

C.1 状態空間の位相

量子力学は，状態空間 $\{\phi, \psi, \cdots\}$ における内積

$$\langle\phi|\psi\rangle^* = \langle\psi|\phi\rangle\,,$$
$$\langle\phi|\alpha\psi + \beta\psi'\rangle = \alpha\langle\phi|\psi\rangle + \beta\langle\phi|\psi'\rangle\,,\ (\alpha, \beta : \text{複素数}), \tag{C.1}$$
$$\|\phi\|^2 = \langle\phi|\phi\rangle \geq 0\,,\ (\ \|\phi\| = 0 \Leftrightarrow \phi = 0\ )$$

の存在を前提とし，ボルンの解釈：$|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ = (状態 ψ の下で，状態 ϕ を見出す確率) を基礎として，状態と観測を結び付ける．状態空間 $\mathbb{H}$ の点列 $\phi_n \in \mathbb{H}, (n = 1, 2, \cdots)$ が

$$\|\phi_n - \phi_m\| \to 0\,,\ (n, m \to \infty) \tag{C.2}$$

を満たすとき，$\{\phi_n\}$ はコーシー点列と呼ばれる．とくに，コーシー点列に $\|\phi_n \to \psi\| \to 0\ (n \to \infty)$ の意味で極限 $\psi \in \mathbb{H}$ が存在すれば，$\mathbb{H}$ はヒルベルト空間を形成する．以後，このような，(C.1) の内積で定義された状態のノルムに基づくヒルベルト空間の位相を，τ_{H} と表記する．

このような状態空間の位相と演算子の関係を明確にするために，正準変数

*1）この付録の解説は，厳密性を求めず，[35] に従って考え方の概略を纏めたものである．

$(\hat{q}, \hat{p})$ と ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ が，生成消滅演算子 $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ を用いて

$$\hat{q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \quad \hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}),$$
$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{m\omega^2}{2}\hat{q}^2 = \hbar\omega\left(\hat{N} + \frac{1}{2}\right), \quad \left(\hat{N} \equiv \hat{a}^\dagger\hat{a}\right),$$
$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}\hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger\hat{a} = 1$$

と与えられる 1 次元調和振動子 (3.2 節) を例にとり，第 2 章の諸定義を再考する．まず，演算子を表現する状態空間 $\mathbb{H}$ の一次独立基底は，$\hat{a}|0\rangle = 0$, ($\langle 0|0\rangle = 1$) で定義される基底状態から

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\hat{a}^\dagger|0\rangle\,, \ (n = 0, 1, 2, \cdots) \tag{C.3}$$

と構成され，固有値方程式 $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$ と直交性 $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$ を満たす．いま，これら一次独立基底の有限個 $\{|0\rangle, |1\rangle, \cdots, |k\rangle\}$ の重ね合わせで作られる状態空間を $\mathbb{R}_k$ とする．明らかに，$\hat{a}\mathbb{R}_k \subset \mathbb{R}_k$ であるが，$\hat{a}^\dagger\mathbb{R}_k \subset \mathbb{R}_{k+1}$ となって，系を表現するために無限個の $\mathbb{R}_k, (k = 0, 1, 2, \cdots)$ が必要である．

また，状態 $|h_n\rangle = \sum_{i=0}^{n} |i\rangle h_n(i) \in \mathbb{R}_n$ のノルムは有限としているため，$\|h_n\|^2 = \sum_{i=0}^{n} |h_n(i)|^2 < \infty$ から $|h_n(i)|^2 \to 0, (i \to \infty)$ である．このとき，状態の点列 $|h_0\rangle, |h_1\rangle, |h_2\rangle, \cdots$ は，$n > m$ に対し

$$\|h_n - h_m\|^2 = \sum_{i=m+1}^{n} |h_n(i) - h_m(i)|^2 \to 0\,, \ (n, m \to \infty) \tag{C.4}$$

を満たしてコーシー点列になる．しかし，点列が $\|h_n - h\| \to 0$, $(n \to \infty)$ の意味で収束すれば，$|h\rangle$ は無限個の基底を含んで $\Psi = \{\mathbb{R}_k\}$ に属さない．かくして，系を量子力学的に表現する状態空間は，全ての $\mathbb{R}_k$, $(k = 0, 1, 2, \cdots)$ とその中のコーシー点列の集積点を加えて完備化した，ヒルベルト空間 $\mathbb{H} = \sum_k \oplus\mathbb{R}_k$ としなくてはならない．

次に，$\mathbb{H}$ 上で**稠密**[*2)] な定義域 $D(\hat{A}) \subset \mathbb{H}$ を持つ演算子 $\hat{A}$ に対し，

$$\langle\hat{A}\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}^\dagger\psi\rangle\,, \ (\phi \in D(\hat{A}),\, \hat{A}^\dagger\psi \in \mathbb{H}) \tag{C.5}$$

により $\hat{A}$ の**共役** (adjoint) 演算子 $\hat{A}^\dagger$ を定義する．さらに，$D(\hat{A}) \subset D(\hat{A}^\dagger)$ で

$$\langle\hat{A}\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{A}\psi\rangle\,, \ (\phi, \psi \in D(\hat{A})) \tag{C.6}$$

が成り立てば，$\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ と書いて $\hat{A}$ を**対称** (symmetric) 演算子と呼ぶ．量子力学でエルミート演算子と呼ぶ演算子は，定義域をこの意味にとれば対称演算子である．対称演算子で，とくに $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger)$ となるものは，**自己共役** (self adjoint) 演算子と呼ばれる．一般に，演算子 $\hat{A}$ に対し，状態 $\phi \in D(\hat{A})$

---

*2)　$D(\hat{A})$ に $D(\hat{A})$ 内のコーシー点列の集積点を付け加えたものが $\mathbb{H}$ になる．

に無関係な定数 $K(>0)$ が存在して，

$$\|\hat{A}\phi\| \leq K\|\phi\|\,, \quad (\,\phi \in D(\hat{A})\,) \tag{C.7}$$

が満たされるとき，$\hat{A}$ は**有界** (bounded) な演算子と呼ばれる．有界な自己共役演算子 $\hat{A}$ に対しては，必然的に $D(\hat{A}) = D(\hat{A}^\dagger)$ である．

さて，ヒルベルト空間の位相 $\tau_{\rm H}$ に対して，拡張された内積

$$\langle\phi|\psi\rangle_p = \langle\phi|(\hat{N}+1)^p|\psi\rangle\,, \quad (p=0,1,2,\cdots) \tag{C.8}$$

から定義されるノルム $\|\phi\|_p \equiv \sqrt{\langle\phi|\phi\rangle_p}$ を基に，状態間の距離を

$$\|\phi-\psi\|_p \to 0,\ (p=0,1,2,\cdots) \quad \Leftrightarrow \quad \phi-\psi \to 0 \tag{C.9}$$

で定義する位相*3) を τ_Φ と書く．τ_Φ の位相は $p=0$ のノルムを通して $\tau_{\rm H}$ の位相を含む，より強い条件の下での位相である．従って τ_Φ の位相の意味で $\Psi = \{\mathbb{R}_k\}$ にコーシー点列の集積点を付け加えて完備化した空間 Φ は $\mathbb{H}$ に含まれ，集積点を除いた Ψ を含む．従って，

$$\Psi \subset \Phi \subset \mathbb{H} \tag{C.10}$$

である．(C.8) の意味でノルムの定義された状態 $|\phi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}|n\rangle c_n$ は

$$\sum_{n=0}^{\infty}(n+1)^p|c_n|^2 < \infty\,,\ (p=0,1,2,\cdots) \tag{C.11}$$

を満たし，Φ は大きなエネルギー $E_n = \hbar\omega(n+\frac{1}{2})$ を見出す確率 $|c_n|^2$ が極端に小さくなる状態から構成された，位相空間に他ならない．Φ 空間の利点は，この空間の位相 τ_Φ の下で $(\hat{a},\hat{a}^\dagger)$ が連続演算子となることである．実際，$\hat{N}\hat{a}^\dagger = \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)$ に注意すると

$$\begin{aligned}
\|\hat{a}^\dagger\phi\|_p^2 &= \langle\phi|\hat{a}(\hat{N}+1)^p\hat{a}^\dagger|\phi\rangle = \langle\phi|(\hat{N}+1)((\hat{N}+1)+1)^p|\phi\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty}\left(1+\frac{1}{n+1}\right)^p\left|\langle n|(\hat{N}+1)^{\frac{p+1}{2}}|\phi\rangle\right|^2 \\
&\leq 2^p\sum_{n=0}^{\infty}\left|\langle n|(\hat{N}+1)^{\frac{p+1}{2}}|\phi\rangle\right|^2 = 2^p\|\phi\|_{p+1}^2
\end{aligned} \tag{C.12}$$

となり，τ_Φ の位相で $\phi \to 0$ であれば $\|\hat{a}^\dagger\phi\|_p \to 0,\ (p=0,1,2,\cdots)$ を得る．従って，$\hat{a}^\dagger$ は τ_Φ の位相で連続演算子となり，同様のことが $\hat{a}$ についても言える．結局，Φ 上では，$(\hat{q},\hat{p})$ も τ_Φ の位相の意味で連続演算子となり，Φ の位相はこれらの演算子の作用により変化しない．付け加えれば，ハミルトニアン演算子 $\hat{H}$ の分散は，ヒルベルト空間上で

$$\Delta_\phi H = \sqrt{\langle\phi|\hat{H}^2|\phi\rangle - \langle\phi|\hat{H}|\phi\rangle^2}\,,\ (\,\phi \in \mathbb{H}\,) \tag{C.13}$$

*3) $\|\phi\|_0 \leq \|\phi\|_1 \leq \|\phi\|_2 \leq \cdots$ を満たす，加算ノルム系による位相となる．

と定義され，$\hat{H}$ が非有界のため任意の ϕ に対しては適用できないが，任意の $\phi \in \Phi \subset \mathbb{H}$ に対しては意味のある定義となっている．

次に，Φ 上の汎関数の空間 Φ^X を考える．この汎関数の意味を，

$$F_f(\phi) = \langle\phi|f\rangle\,,\quad (\,\phi \in \Phi,\, f \in \Phi^X\,) \tag{C.14}$$

で定義するなら，

$$F_f(\alpha\phi + \beta\psi) = \langle\phi|f\rangle + \beta\psi|f\rangle = \alpha^* F_f(\phi) + \beta^* F_f(\psi)\,, \tag{C.15}$$

$$F_{\alpha f+\beta g}(\phi) = \langle\phi|\alpha f + \beta g\rangle = \alpha F_f(\phi) + \beta F_g(\phi) \tag{C.16}$$

を得て，(C.15) から $\{F_f\}$ は Φ 上の反線形な汎関数になり，同時に (C.16) より $\{F_f\}$ 自身が線形空間を形成することになる．また，点列$\phi_i \in \Phi$ が τ_Φ 位相の意味で $\phi_i \to \phi$ と収束すれば，$p = 0$ のヒルベルト空間の位相 τ_{H} の意味でも収束し，内積で定義された汎関数も $F_f(\phi_i) \to F_f(\phi)$ の形で弱収束する．従って，状態 $f \in \mathbb{H}$ も**核型空間**と呼ばれる Φ 上の τ_Φ 位相の意味で連続な汎関数を定義し，全体として

$$(\,\Psi \subset\,)\ \ \Phi \subset \mathbb{H} \subset \Phi^X \tag{C.17}$$

の構造を持つ関数空間となっている．(C.17) のヒルベルト空間を含む 3 重構造が，ゲルファントにより導入された**ゲルファントの三つ組**である（Rigged Hilbert space とも呼ばれ，以下 R.H.S と略称する）．R.H.S において，Φ 上で定義されたτ_Φ 位相の意味で連続な自己共役演算子 $\hat{A}$ に対し，

$$F_f(\hat{A}\phi) = \langle\hat{A}\phi|f\rangle = \langle\phi|\hat{A}^X f\rangle = F_{\hat{A}^X f}(\phi)\,,\ (\phi \in \Phi,\ f \in \Phi^X) \tag{C.18}$$

により，汎関数の空間 Φ^X 上への拡張 $\hat{A}^X$ を定義できる．$\hat{A}\phi$ の連続性により，$\hat{A}^X$ は Φ^X 空間の位相の意味でも連続となる．従って，$(\hat{q}, \hat{p})$ の拡張 $(\hat{q}^X, \hat{p}^X)$ は，Φ^X の位相の意味で連続演算子となっている．必ずしも自己共役ではない演算子 $\hat{A}$ に対しても，$\Phi \subset \mathbb{H}$ 上で $\hat{A}^\dagger$ が存在すれば，

$$\langle\hat{A}^\dagger\phi|f\rangle = \langle\phi|\hat{A}^X f\rangle\,,\ (\phi \in \Phi,\ f \in \Phi^X) \tag{C.19}$$

により Φ^X 上に拡張された演算子 $\hat{A}^X$ を定義することができ，(C.18) はこの特別な場合に帰着する．

このような拡張された演算子の考え方の下に，Φ 上で定義された演算子 $\hat{A}$ の**一般化された固有状態**を

$$F_{f_\lambda}(\hat{A}^\dagger\phi) = \langle\hat{A}^\dagger\phi|f_\lambda\rangle = \langle\phi|\hat{A}^X f_\lambda\rangle = \lambda\langle\phi|f_\lambda\rangle\,, \tag{C.20}$$
$$(\text{任意の}\ \phi \in \Phi,\ f_\lambda \in \Phi^X)$$

を満たす汎関数 F_{f_λ} あるいは $f_\lambda \in \Phi^X$ で定義し，これを固有値方程式 $\hat{A}^X|f_\lambda\rangle = \lambda|f_\lambda\rangle$ の意味するものとする．このような，一般化された固有状態

に対し，次のゲルファントの核型スペクトル定理*4)が成立する．

核型スペクトル定理

R.H.S $\Phi \subset \mathbb{H} \subset \Phi^X$ の枠組みにおいて，Φ 上の演算子 $\hat{A}$ は τ_Φ 位相により連続で循環的*) な演算子であるとする．このとき，一般化された固有状態 $|f_\lambda\rangle$ が与える固有値空間 $\Lambda = \{\lambda\}$ 上に正定値な積分測度 $d\mu(\lambda)$ が存在し，任意の $\psi, \phi \in \Phi$ に対し

$$\langle\psi|\phi\rangle = \int_\Lambda d\mu(\lambda)\langle\psi|f_\lambda\rangle\langle f_\lambda|\phi\rangle\,, \qquad (\text{C.21})$$

$$(\ \langle f_\lambda|\phi\rangle = \langle\phi|f_\lambda\rangle^*\ ).$$

*) 調和振動子のヒルベルト空間は，基底状態 $|0\rangle$ に $(\hat{a}, \hat{a}^\dagger)$ あるいは $(\hat{q}, \hat{p})$ を作用させることにより生じる．演算子 $\hat{A}$ がこのような性格を持つとき，循環的演算子と呼ばれる．

この定理により，結局のところ演算子の定義域を明確にし，固有状態を汎関数まで拡張して考える必要があることを認識すれば，一般的に量子力学で行っている操作的な計算がほぼそのまま，正しいことが保証される．調和振動子の例に戻れば，固有値方程式

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle\,, \qquad (\text{C.22})$$

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q') \qquad (\text{C.23})$$

は形式的に解けて，

$$|q\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\pi\hbar}}\,e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)q^2} e^{-\frac{1}{2}\hat{a}^{\dagger 2} + \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}q\hat{a}^\dagger}|0\rangle \qquad (\text{C.24})$$

を得る．この解 $|q\rangle$ は，$\langle q|q\rangle = \delta(0) = \infty$ で $\mathbb{H}$ には属さないが，(C.22) を $\langle\phi|\hat{q}|q\rangle = q\langle\phi|q\rangle$, $(\phi \in \Phi)$ の意味で成立させる．また，(C.23) より，$|q\rangle$ は $\Phi \subset \mathbb{H}$ 上の汎関数で，練習問題 3.2.2 より

$$\langle n|q\rangle = \langle q|n\rangle = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\frac{e^{-\frac{1}{2}\xi^2}}{\sqrt{n!}2^{\frac{n}{2}}}H_n(\xi) \qquad (\text{C.25})$$

であった．さらに，(C.23) あるいは (C.24) を使った直接の計算から，

$$\int dq\langle n|q\rangle\langle q|m\rangle = \langle n|m\rangle = \delta_{nm} \qquad (\text{C.26})$$

を確かめることもできる．上の例は，背後にある R.H.S の枠組みをあまり意識しなくてよいものとなっているが，R.H.S 構造への注意深い配慮を必要とする問題もある．

*4) 証明は，例えば [36] の第 1 章 4.5 にある．

付録 D
対称性と群

力学系の対称性は，系を記述する作用，あるいはハミルトニアンの対称性と置き換えてよく，その対称変換を引き起こす無限小変換の生成子は保存量となった（ネーターの定理）．自由粒子の平行移動対称性と生成子としての運動量や，中心力の下にある粒子の回転対称性と生成子としての軌道角運動量はそのような例であり，系の観測量もこれらの群の表現で許される保存量を含む形で表された．また，相対論まで考慮に入れると，粒子の存在する自由空間そのものをミンコウスキー時空と考えなくてはならず，ローレンツ変換の下での対称性が基本となる．そこで以下では，本文の理解に役立つ範囲で，回転群とローレンツ群の簡単な解説をまとめておく．

D.1 回転群

3 次元空間の回転 R は，位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ を他の位置ベクトル $\boldsymbol{r}'$ に移す変換で，$\boldsymbol{r}'^2 = \boldsymbol{r}^2$ を保つものである．以下，ベクトルをブラ・ケット表示で

$$|\boldsymbol{r}\rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_2 \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{3} |\boldsymbol{e}_i\rangle x_i\,, \quad \langle \boldsymbol{r}| = [x_1, x_2, x_3] = \sum_{i=1}^{3} x_i \langle \boldsymbol{e}_i|, \tag{D.1}$$

($(\boldsymbol{e}_i)_j = \langle \boldsymbol{e}_j | \boldsymbol{e}_i \rangle = \delta_{ij}$) と表し，回転を 3×3 行列で $|\boldsymbol{R}'\rangle = R|\boldsymbol{r}\rangle$ と書くことにすれば，回転はノルムを不変にする変換 $\langle \boldsymbol{r}'|\boldsymbol{r}'\rangle = \langle \boldsymbol{r} R^T R|\boldsymbol{r}\rangle = \langle \boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}\rangle$ (T : 転置) で特徴づけられ，これが任意の $\boldsymbol{r}$ について成り立つことから，回転行列は

$$R^T R = R R^T = I, \ (I : 3 \times 3 \text{単位行列}) \tag{D.2}$$

を満たす．この場合，R_1, R_2 が (D.2) を満たせば，$(R_1 R_2)^T (R_1 R_2) = R_2^T R_1^T R_1 R_1 = R_2^T R_2 = I$ となって，回転行列の積も回転行列であり，この積が結合率を満たすことも明らかである．さらに，単位行列 I も（何もしな

い）回転行列であり，逆変換も $(R^{-1})^T R^{-1} = RR^T = I$ より回転行列である．こうして，(D.2) を満たす R は，行列の積の下で群[*1] の要件を満たす．回転行列 R は 9 成分の実行列であるが，$(R^T R)^T = R^T R$ から (D.2) を通して 6 条件が課せられているため，独立な自由度は 3 であり，その全体は 3 次元直交群 (orthogonal group)$O(3)$ を形成する．定義により行列式 $(\det R)^2 = 1$ で，R には反転 $R = -I$ が含まれるが，とくに $\det R = 1$ で連続的に恒等変換とつながる変換を，記号 S を付けて $SO(3)$ 変換と呼ぶ．

次に，$R \in SO(3)$ の生成子を知るために，第 3 軸の周りの角度 θ_{12} の回転 $R(\theta_{12})$ を考える．このとき，回転により $\boldsymbol{e}_3$ は不変で，1-2 平面の基底ベクトルは，

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{e}_1'\rangle &= R(\theta_{12})|\boldsymbol{e}_1\rangle = |\boldsymbol{e}_1\rangle \cos\theta_{12} + |\boldsymbol{e}_2\rangle \sin\theta_{12}\,, \\
|\boldsymbol{e}_2'\rangle &= R(\theta_{12})|\boldsymbol{e}_2\rangle = -|\boldsymbol{e}_1\rangle \sin\theta_{12} + |\boldsymbol{e}_2\rangle \cos\theta_{12}
\end{aligned}
$$

と変換される．この形から，

$$
\begin{aligned}
R(\theta_{12}) &= |\boldsymbol{e}_1\rangle\langle\boldsymbol{e}_1| \cos\theta_{12} + |\boldsymbol{e}_2\rangle\langle\boldsymbol{e}_1| \sin\theta_{12} \\
&\quad - |\boldsymbol{e}_1\rangle\langle\boldsymbol{e}_2| \sin\theta_{12} + |\boldsymbol{e}_2\rangle\langle\boldsymbol{e}_2| \cos\theta_{12} \\
&= I_{12} \cos\theta_{12} + iM_{12} \sin\theta_{12}
\end{aligned}
\tag{D.3}
$$

である．ここで，$I_{12} = |\boldsymbol{e}_1\rangle\langle\boldsymbol{e}_1| + |\boldsymbol{e}_2\rangle\langle\boldsymbol{e}_2|$ は 1-2 平面の単位行列であり，また

$$
M_{ij} = i\left(|\boldsymbol{e}_i\rangle\langle\boldsymbol{e}_j| - |\boldsymbol{e}_j\rangle\langle\boldsymbol{e}_i|\right)\,,\ (\,i \neq j\,) \tag{D.4}
$$

は i-j 面の回転の生成子である．この意味は，1-2 平面上で $M_{12}^2 = I_{12}$ より

$$
R(\theta_{12}) = e^{i\theta_{12}M_{12}} \quad \text{および} \quad M_{12} = -i\frac{d}{d\theta_{12}}R(\theta_{12})\bigg|_{\theta_{12}=0} \tag{D.5}
$$

となり，M_{12} が $R(\theta_{12})$ の局所構造を決定することにある．(D.5) は，(リー) 群とその生成子の基本的な関係であり，$e^{i\theta_{12}M_{12}}$ と同様に $e^{i\theta_{23}M_{23}}$, $e^{i\theta_{31}M_{31}}$ は，それぞれ 2-3 平面，および 3-1 平面の回転行列となる．一般的な回転行列を $R = e^{iG}$ と書くと，iG は (D.2) より $(iG)^T = -iG$ を満たす実行列でなくてはならない．従って，G は $M_1 = M_{23}, M_2 = M_{31}, M_3 = M_{12}$ の線形結合[*2]となり，繰り返された添字に関する和の記号を省略する規約に従うと

$$
R = e^{\frac{i}{2}\theta_{ij}M_{ij}} = e^{i\theta_i M_i}, \tag{D.6}
$$

---

*1） 集合 $G = \{g_i\}$ の要素に，積 $g_i \circ g_j$ が定義されて以下の条件を満たす：

- $g_1, g_2 \in G \to g_1 \circ g_2 \in G$,
- $g_1, g_2, g_3 \in G \to (g_1 \circ g_2) \circ g_3 = g_1 \circ (g_2 \circ g_3)$,
- 任意の $g_i \in G$ に対し，$I \circ g_i = g_i$ となる単位元 $I \in G$ が存在,
- 任意の $g_i \in G$ に対し，$g_i^{-1} \circ g_i = I$ となる逆元 $g_i^{-1} \in G$ が存在.

*2） $M_i^T = -M_i$ は明らか．また，$M_i^2 = 1 - |e_i\rangle\langle e_i|$, $M_i M_j = 0, (i \neq j)$ から $\frac{1}{2}\mathrm{tr}(M_i M_j) = \delta_{ij}$ を得て，$\{iM_i\}$ は一次独立な 3×3 反対称実行列となる．

$$\theta_1 = \theta_{23} = -\theta_{32},\ M_1 = M_{23} = -M_{32},\quad (1, 2, 3\text{–循環的})$$

と表すことができる．$\langle \boldsymbol{e}_i | \boldsymbol{e}_j \rangle = \delta_{ij}$ に注意すると，$\{M_{ij}\}$ は $SO(3)$ 代数

$$[M_{jk}, M_{kl}] = i\left(\delta_{jk} M_{il} - \delta_{jl} M_{ik} - \delta_{ik} M_{jl} + \delta_{il} M_{jk}\right) \tag{D.7}$$

を満たすことが確かめられる．この代数は，完全反対称テンソル $\epsilon_{ijk} = \boldsymbol{e}_i \cdot (\boldsymbol{e}_j \times \boldsymbol{e}_k)$ を用いると，$\{M_i\}$ の交換関係

$$[M_i, M_j] = i\epsilon_{ijk} M_k \tag{D.8}$$

に帰着する．この形は，$\hbar = 1$ と置いた角運動量演算子の交換関係に他ならず，ϵ_{ijk} は $SO(3)$ 代数の構造定数と呼ばれる．一般的なリー群も，対応する構造定数 f_{ijk} を用いた生成子の交換関係 $[M_i, M_j] = i f_{ijk} M_k$, $(i, j, k = 1, 2, \cdots, N)$ で特徴づけられる．(D.8) と関連する例として，2 次元複素ベクトル $|\boldsymbol{\Phi}\rangle = \sum_{i=1}^{2} |\boldsymbol{e}_i\rangle \Phi_i$ の変換 $|\boldsymbol{\Phi}'\rangle = U|\boldsymbol{\Phi}\rangle$ を考える．この変換が，$\langle \boldsymbol{\Phi}' | \boldsymbol{\Phi}' \rangle = \langle \boldsymbol{\Phi} | U^\dagger U | \boldsymbol{\Phi} \rangle = \langle \boldsymbol{\Phi} | \boldsymbol{\Phi} \rangle$ の意味でノルムを不変にするなら，変換行列は $U^\dagger U = I$ を満たし $U(2)$ 変換と呼ばれる．この場合も $|\det U| = 1$ であり，とくに $\det U = 1$ の変換は連続的に恒等変換につながり，$SU(2)$ 変換と呼ばれる．この変換を生成子で $U = e^{iG}$ と書けば，$U^\dagger = U^{-1}$ より $G^\dagger = G$ であり，かつ $\det U = e^{i \operatorname{tr} G} = 1$ から $\operatorname{tr} G = 0$ となる．従って，これを満たす独立な生成子の行列は，

$$S_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ S_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ S_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{D.9}$$

と求まる．容易に確かめられるように，(D.9) の生成子は (D.8) と同じ代数を満たし，$SO(3)$ と $SU(2)$ は局所的に同じ構造を持つことになる．

D.2 ローレンツ群

空間回転の生成子の代数構造 (D.7) は，不定計量の 2 次形式

$$A^2 \equiv (A^0)^2 - (A^1)^2 - (A^2)^2 - (A^3)^2 \tag{D.10}$$

を不変にする 4 次元ベクトル A^μ, $(\mu = 0, 1, 2, 3)$ の変換にも，容易に拡張できる．3 次元の場合と同様に，ベクトル (A^μ) を 4 次元の基底ベクトル $\boldsymbol{e}_\mu$, $((\boldsymbol{e}_\mu)_\nu = \delta_{\mu\nu})$ を用いてケット $|A\rangle = |\boldsymbol{e}_\mu\rangle A^\mu$ の形に表すと，上記の不変量は $A^2 = \langle A | \eta | A \rangle$ と表される．ここで η は，ミンコウスキー計量と呼ばれる 4×4 行列

$$(\eta_{\mu\nu}) = (\eta^{\mu\nu}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{D.11}$$

である．必要とあれば，ブラベクトル $\langle \bar{A}| = \langle A|\eta = A^\mu \langle \bar{\boldsymbol{e}}_\mu|$, $(\langle \bar{\boldsymbol{e}}_\mu| = \langle \boldsymbol{e}_\mu|\eta\ )$ を定義すれば，$A^2 = \langle \bar{A}|A\rangle = \eta_{\mu\nu}A^\mu A^\nu = A^\mu A_\mu$, $(\ A_\mu = \eta_{\mu\nu}A^\nu\ )$ とも書ける[*3)]．このとき，μ-ν 面の回転の生成子は

$$M_{\mu\nu} = i(|\boldsymbol{e}_\mu\rangle\langle \bar{\boldsymbol{e}}_\nu| - |\boldsymbol{e}_\nu\rangle\langle \bar{\boldsymbol{e}}_\mu|) \tag{D.12}$$

であり，$\langle \bar{\boldsymbol{e}}_\mu|\boldsymbol{e}_\nu\rangle = \eta_{\mu\nu}$ から生成子の満たすリー代数は

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = i\left(\eta_{\nu\rho}M_{\mu\sigma} - \eta_{\nu\sigma}M_{\mu\rho} - \eta_{\mu\rho}M_{\nu\sigma} + \eta_{\mu\sigma}M_{\nu\rho}\right) \tag{D.13}$$

となる．この場合，$\bar{\boldsymbol{e}}_i = -\boldsymbol{e}_i, (i = 1, 2, 3)$ から $M_{12}^2 = I_{12}$ となり，1-2 平面の回転 $e^{i\theta_{12}M_{12}}$ は (D.3) と同形になる．一方，生成子 M_{01} は，$\bar{\boldsymbol{e}}_0 = \boldsymbol{e}_0$ から $M_{01}^2 = -I_{01}$ $(I_{01} = |\boldsymbol{e}_0\rangle\langle \boldsymbol{e}_0| + |\boldsymbol{e}_1\rangle\langle \boldsymbol{e}_1|)$ を満たし，0-1 平面の変換

$$R(\theta_{01}) = e^{i\theta_{01}M_{01}} = I_{01}\cosh(\theta_{01}) + iM_{01}\sinh(\theta_{01}) \tag{D.14}$$

を導く．従って $|A'\rangle = R(\theta_{01})|A\rangle$ を成分で書くと，

$$\begin{aligned} A^{0\prime} &= A^0\cosh(\theta_{01}) + A^1\sinh(\theta_{01}), \\ A^{1\prime} &= A^1\cosh(\theta_{01}) + A^0\sinh(\theta_{01}), \end{aligned} \tag{D.15}$$

$(A'^2 = A^2,\ A'^3 = A^3)$ となる，この変換は (D.10) の 2 次形式を不変とする 0-1 面のローレンツ変換であり，一般の $\{M_{\mu\nu}\}$ を生成子とする変換群が $O(3,1)$（空間次元 3，時間次元 1 のローレンツ群）である．このとき，$|A'\rangle = R|A\rangle$, $(R = [R^\mu{}_\nu])$ で定義されるローレンツ変換の行列は，$R^T\eta R = \eta$, $(\eta_{\mu\nu}R^\mu{}_\rho R^\nu{}_\sigma = \eta_{\rho\sigma})$ を満たして，$(\det R)^2 = 1$ と共に $\eta_{\mu\nu}R^\mu{}_0 R^\nu{}_0 = 1$ より $(R^0{}_0)^2 = 1 + \sum_{k=1}^3 (R^k{}_0)^2 \geq 1$ を導く．従って，変換は $\det R = \pm 1$ および $R^0{}_0 \geq 1$, $R^0{}_0 \leq 1$ で分類され，とくに $\det R = 1$ かつ $R^0{}_0 \geq 1$ は恒等変換に連続的につながり，**固有ローレンツ変換**と呼ばれる．固有ローレンツ変換の 4×4 行列は，(D.12) を生成子として作られる．

さて，我々の時空はミンコウスキー時空であり，自由粒子が時間 Δt, 空間間隔 $\Delta x^i, (i = 1, 2, 3)$ を移動したとき，$\Delta x^2 = \eta_{\mu\nu}\Delta x^\mu \Delta x^\nu$, $(x^0 = ct;\ c =$ 光速) は慣性系によらず同じ値となる．言いかえれば，$A^\mu \leftrightarrow \Delta x^\mu$ と対応させ

*3) 4 次元時空のベクトルに対しては，3 次元空間のベクトル成分を $\boldsymbol{A} = (A^1, A^2, A^3)$ と上付きに記し，これに時間成分 A^0 を加えて $(A^\mu) = (A^0, \boldsymbol{A})$ と並べたものを，**反変ベクトル**と呼ぶ．これに対し，$(A_\mu) = (\eta_{\mu\nu}A^\nu) = (A^0, -\boldsymbol{A})$ を**共変ベクトル**と呼び，ベクトルの反変成分と共変成分を縮約した $A^\mu B_\mu = \eta_{\mu\nu}A^\mu B^\nu$ が，ローレンツ変換の下で不変なスカラー量となる．反変，共変の区別に応じて，4 次元座標 (x^μ) の微分演算子も，$\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x^\mu}$, $\partial^\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$ 等と記される．

ると，(D.15) は慣性系の変換の意味を持つ．付け加えれば，質量 m の相対論的自由粒子の作用は，速度 dx^μ で書ける作用の次元を持つ不変量であり，$ds = \sqrt{dx^2}$ として

$$S = -mc\int ds = -mc\int d\tau\sqrt{\dot{x}^2}\,, \quad \left(\dot{x}^\mu = \frac{dx^\mu}{d\tau}\right) \tag{D.16}$$

の形となる．τ は運動の順序付けを行うために導入した粒子の固有時間であり，τ を時間とするラグランジアンは $L = -mc\sqrt{\dot{x}^2}$ であるから，x^μ に共役な粒子の 4 次元運動量を $p_\mu \equiv -\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^\mu} = mc\dot{x}^\mu/\sqrt{\dot{x}^2}$ と定義すると，$E = cp^0$ は粒子のエネルギーの意味を持ち，3 次元運動量と

$$p^2 - (mc)^2 = 0\,, \quad \left(p^2 = \eta^{\mu\nu}p_\mu p_\nu = \left(\frac{E}{c}\right)^2 - \boldsymbol{p}^2\right) \tag{D.17}$$

の拘束条件で結ばれる．必要に応じて，1 脚子と呼ばれる補助変数 $e(\tau)$ を用いれば，自由粒子の作用は

$$S = \int d\tau L'(e,\dot{x}) = -\frac{1}{2}\int d\tau\left\{\frac{\dot{x}^2}{e} + (mc)^2 e\right\} \tag{D.18}$$

と書くこともできる[*4)]．このとき，$\frac{\partial L'}{\partial e} = -\frac{1}{2}\{-\frac{\dot{x}^2}{e^2} + (mc)^2\} = 0$ から $e = \frac{\sqrt{\dot{x}^2}}{mc}$ を得て，これを $L(e,\dot{x})$ に代入すると (D.18) は (D.16) に戻る．また，$p_\mu = -\frac{\partial L'}{\partial \dot{x}^\mu} = \frac{\dot{x}_\mu}{e}$ であるため，相対論的波動方程式の基礎となる分散関係 (D.17) は，何れの作用からも導かれる．

以上に述べた $SO(3)$ の代数 (D.7) と $O(3,1)$ の代数 (D.13) は，それぞれ $M_{ij} = ix_{[i}\partial_{j]}$ および $M_{\mu\nu} = ix_{[\mu}\partial_{\nu]}$ においても満たされ，(D.4) や (D.12) はそれらの表現の一つに過ぎない．$SO(3)$ では，$\{M_i\}$ はカシミヤ不変量 $C = \frac{1}{2}M_{ij}M_{ij} = \sum_i M_i^2$ と可換であり，その値（$\hbar = 1$ とした角運動量の大きさで決まる数値）が表現空間を決定する．一方，$SO(3,1)$ では，$S_i = M_{0i}$, $R_i = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}M_{jk}, (i,j,k = 1,2,3)$ と置くと，(D.13) が

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk}S_k,\ [S_i, R_j] = i\epsilon_{ijk}R_k,\ [R_i, R_j] = -i\epsilon_{ijk}S_k \tag{D.19}$$

と分解され，この代数の下でのカシミヤ不変量は

$$Q_1 = \boldsymbol{R}^2 - \boldsymbol{S}^2\,,\quad Q_2 = \boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{S} \tag{D.20}$$

と書けて，Q_1, Q_2 の値が表現空間を定める数値となる．

D.3　空間回転と角運動量

角運動量演算子は空間回転の生成子であり，これにより生成される有限変換の行列は，$SO(3)$ 回転群の表現行列となっている．いま，角運動量演算子を

*4）(D.18) の作用は，質量が 0 の極限においても意味を持つ．

$J_i = \frac{1}{\hbar}\hat{L}_i, (i = 1, 2, 3)$ とおいて無次元の演算子に書き換えると，無限小回転を特徴づける交換関係は D.1 節の (D.8) と一致し，

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk}J_k, \ (i, j, k = 1, 2, 3), \tag{D.21}$$

あるいは $J_\pm = J_1 \pm iJ_2$ として

$$[J_3, J_\pm] = \pm J_\pm, \tag{D.22}$$

$$[J_+, J_-] = 2J_3 \tag{D.23}$$

と表される．この代数の表現空間は，実際には $SO(3)$ 群より広い群構造と結び付いていることが確かめられる．まず定義より，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 &= \frac{1}{2}\{J_+, J_-\} + J_3^2 \\ &= J_+J_- + J_3(J_3 - 1) = J_-J_+ + J_3(J_3 + 1) \end{aligned} \tag{D.24}$$

であるが，(D.23) より $[J_3, J_+J_-] = [J_3, J_+]J_- + J_+[J_3, J_-] = 0$ となり，$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 には共通の固有状態が存在して，

$$\boldsymbol{J}^2|a, b\rangle = a|a, b\rangle\,, \quad J_3|a, b\rangle = b|a, b\rangle \tag{D.25}$$

と置くことができる．ここで $a \geq 0$ であり，また状態は $\langle a, b|a, b\rangle = 1$ で規格化されているとする．このとき，

$$J_3(J_\pm|a, b\rangle) = (\pm J_\pm + J_\pm J_3)|a, b\rangle = (b \pm 1)J_\pm|a, b\rangle \tag{D.26}$$

から，$J_\pm|a, b\rangle \propto |a, b \pm 1\rangle$ となる．従って，固有値 b の値は ± 1 の単位で増減するが，$\|J_+|a, b\rangle\|^2 = \langle a, b|\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3 + 1)|a, b\rangle = a - b(b + 1) \geq 0$ から，b の大きさに上限がある．この上限を $j = \max(b)$ と置くと，$J_+|a, j\rangle = 0$ から $a = j(j + 1)$ となる．一方，$\|J_-|a, b\rangle\|^2 = \langle a, b|\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3 - 1)|a, b\rangle = a - b(b - 1) \geq 0$ から，b に下限 $\min(b)$ のあることも分かり，$J_-|a, b\rangle = 0$ から $\min(b) = -j$ が得られる．結局，b は $b = j, j - 1, \cdots, -j$ の $2j + 1$ 個の値をとることになり，この個数が整数であることから，j は $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots$ の値をとることになる．

そこで，改めて $|a, b\rangle = |j, m\rangle$ と書くと，(D.21) あるいは (D.23) の代数で規定される演算子 $(\boldsymbol{J}^2, J_3)$ の固有状態は

$$\boldsymbol{J}^2|j, m\rangle = j(j + 1)|j, m\rangle\,, \ \left(j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \cdots\right), \tag{D.27}$$

$$J_3|j, m\rangle = m|j, m\rangle\,, \ (\, m = j, j - 1, \cdots, -j\,) \tag{D.28}$$

と定まる．(2.114), (2.115) は，これを $\hat{L}_i$ の形に置き戻したものであるが，固有値が $j = 0, 1, 2, \cdots$ に制限されている．これは，$\hat{\boldsymbol{L}}$ の本来の定義が軌道角運動量演算子 $\boldsymbol{r} \times (-i\hbar\nabla)$ であり，極座標で $\nabla = \boldsymbol{e}_r\frac{\partial}{\partial r} + \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \boldsymbol{e}_\varphi\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}$

と書けることに注意すると，

$$\hat{\boldsymbol{L}} = -i\hbar\left(\boldsymbol{e}_\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \boldsymbol{e}_\theta\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{D.29}$$

と，角度変数のみで構成されることによる．このとき，$\boldsymbol{e}_3\cdot\boldsymbol{e}_\theta = -\sin\theta$ および $\boldsymbol{e}_3\cdot\boldsymbol{e}_\varphi = 0$ から

$$\hat{L}_3 = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}. \tag{D.30}$$

また，$\boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{e}_\theta = \cos\theta\cos\varphi$, $\boldsymbol{e}_2\cdot\boldsymbol{e}_\theta = \cos\theta\sin\varphi$, および $\boldsymbol{e}_1\cdot\boldsymbol{e}_\varphi = -\sin\varphi$, $\boldsymbol{e}_2\cdot\boldsymbol{e}_\varphi = \cos\varphi$ より

$$\hat{L}_1 = -i\hbar\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{D.31}$$

$$\hat{L}_2 = -i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right), \tag{D.32}$$

あるいは

$$\hat{L}_\pm = \hbar e^{\pm i\varphi}\left(\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \tag{D.33}$$

である．従って，$|l,m\rangle$ の角度表示を $Y_{lm}(\theta,\varphi) = \langle\theta,\varphi|l,m\rangle$ とおくと，

$$\hat{L}_3 Y_{lm}(\theta,\varphi) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{D.34}$$

から，求める角度表示の固有状態は

$$Y_{lm}(\theta,\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{im\varphi}\Theta_{lm}(\theta) \tag{D.35}$$

の構造を持つ．ここで，3 次元空間が単連結であり，波動関数が $\hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi) = \hbar m Y_{lm}(\theta,\varphi+2\pi)$ を満たす 1 価関数になることに注意すると，$m = 0, \pm1, \pm2, \cdots$ を得て軌道角運動量に対して $l = 0, 1, 2, \cdots$ の制限が現れるのである．

一方，(D.21) の代数構造の表現空間はもっと広く，半奇数の j の状態も許すことになる．この詳細を知るために，状態 $|j,m\rangle$ の規格化因子を決定する．まず，$\boldsymbol{J}^2$ の固有値が $j(j+1)$ である表現空間を考え，J_3 が最大の状態 $|j,j\rangle$ を $\langle j,j|j,j\rangle = 1$ と規格化する．このとき，1 に規格化された状態を

$$|j,m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_m}}(J_-)^{j-m}|j,j\rangle \tag{D.36}$$

とおくと，

$$\begin{aligned}
1 &= \frac{1}{N_m}\langle j,j|(J_+)^{j-m}(J_-)^{j-m}|j,j\rangle \\
&= \frac{1}{N_m}\langle j,j|(J_+)^{j-m-1}[\boldsymbol{J}^2 - J_3(J_3-1)](J_-)^{j-m-1}|j,j\rangle
\end{aligned}$$

$$= \frac{N_{m-1}}{N_m}\{j(j+1)-m(m+1)\}\langle j,m+1|j,m+1\rangle$$
$$= \frac{N_{m-1}}{N_m}(j+m+1)(j-m).$$

従って，

$$N_m = \frac{N_m}{N_{m+1}}\frac{N_{m+1}}{N_{m+2}}\cdots\frac{N_{j-1}}{N_j}\,,\quad (\,N_j=1\,)$$
$$=\{(j+m+1)(j+m+2)\cdots(2j)\}\{(j-m)(j-m-1)\cdots 1\}$$
$$=\frac{(2j)!(j-m)!}{(j+m)!}. \tag{D.37}$$

最後の結果から，容易に

$$J_\pm|j,m\rangle = \sqrt{j(j+1)-m(m\pm1)}|j,m\pm1\rangle \tag{D.38}$$

を確かめることもできる．こうして $j=0,1,\cdots$ の場合，$J_-=\frac{1}{\hbar}L_-$ として (D.36) の角度表示 $\langle\theta,\varphi|l,m\rangle$ を計算すると，正しく $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ に一致する．

一方，j が半奇数で，とくに最小値 $j=\frac{1}{2}$ の場合，

$$J_3\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle = \pm\frac{1}{2}\left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle,\quad J_\pm\left|\frac{1}{2},\mp\frac{1}{2}\right\rangle = \left|\frac{1}{2},\pm\frac{1}{2}\right\rangle, \tag{D.39}$$

の 2 次元表現が得られ，$|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$ に作用する行列として

$$J_3=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix},\ J_+=\begin{pmatrix}0&1\\0&0\end{pmatrix},\ J_-=\begin{pmatrix}0&0\\1&0\end{pmatrix}, \tag{D.40}$$

が求まる．このような $j=\frac{1}{2}$ の表現では，電子の自転に由来する角運動量であるスピン (spin) に結び付けて，$J_i\to S_i=\frac{1}{2}\sigma_i$，ただし

$$\sigma_1=\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix},\ \sigma_2=\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix},\ \sigma_3=\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix} \tag{D.41}$$

の記号が用いられる．$\sigma_i,(i=1,2,3)$ はパウリ行列と呼ばれ，$S_i=\frac{1}{2}\sigma_i$ は (D.9) に与えた $SU(2)$ 変換の生成子に他ならない．

容易に確かめられるように，パウリ行列は $\sigma_i^\dagger=\sigma_i$, $\mathrm{tr}(\sigma_i)=0$ を満たし，実ベクトル $\boldsymbol{x}$ との内積 $(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\sigma})$ もトレースが 0 のエルミート行列となっている．また，$SU(2)$ 変換 $U^\dagger(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\sigma})U$ を実行した結果もトレースが 0 のエルミート行列であり，$(\boldsymbol{x}'\cdot\boldsymbol{\sigma})$ の形に書ける．このとき，$\boldsymbol{x}'^2=\det(\boldsymbol{x}'\cdot\boldsymbol{\sigma})=\det(\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{\sigma})=\boldsymbol{x}^2$ から，$\boldsymbol{x}\to\boldsymbol{x}'$ の変換は，ノルムを変えない空間回転となっている．必要とあれば，$\frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_i\sigma_j)=\delta_{ij}$ に注意して，$SU(2)$ 変換と $SO(3)$ 変換の直接の対応を

$$x_i'=R_{ij}x_j\,,\quad \left(\;R_{ij}=\frac{1}{2}\mathrm{tr}\left(\sigma_iU^\dagger\sigma_jU\right)\;\right) \tag{D.42}$$

と表すこともできる．明らかに，$\pm U$ が同一の回転行列 $R = (R_{ij})$ を与え，両者の対応は 2 対 1 となっている．因みに，パウリ行列を使うとローレンツ変換と $SL(2,C)$ の間の対応を与えることもできる．ここで，$L \in SL(2,C)$ は，$\mathrm{tr}L = 0$, $\det L = 1$ を満たす 2×2 複素行列で，6 個の独立な実パラメーター（= ローレンツ変換の自由度）を持つ．このとき，2×2 エルミート行列

$$x^\mu \sigma_\mu = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x - 3 \end{pmatrix}, \quad \sigma_0 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{D.43}$$

を $L \in SU(2)$ で変換した $L^\dagger (x^\mu \sigma_\mu) L$ もまた 2×2 エルミート行列で，$x'^\mu \sigma_\mu$ と書ける．従って $x'^2 = \det(x'^\mu \sigma_\mu) = \det(x^\mu \sigma_\mu) = x^2$ を得て，$x'^\mu = R^\mu{}_\nu x^\nu$, $\left(R^\mu{}_\nu = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\sigma_\mu L^\dagger \sigma_\nu L)\right)$ はローレンツ変換となる．この場合も，L と R の対応は 2 対 1 である．

D.4 角運動量の基本表現と積表現

最後に，角運動量の表現空間を最小次元の $j = \frac{1}{2}$ 表現（基本表現）の積表現として構成する，シュウィンガーの $SU(2)$ 振動子の方法[24]について触れておこう．いま，交換関係 $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$, $(i, j = 1, 2)$ を満たす生成消滅演算子から定義される演算子

$$\hat{S}_a = \frac{1}{2}\hat{a}_i^\dagger (\sigma_a)_{ij} \hat{a}_j, \quad (a = 1, 2, 3) \tag{D.44}$$

に対し，$[\sigma_a, \sigma_b] = 2i\epsilon_{abc}\sigma_c$ に注意して，交換関係

$$[\hat{S}_a, \hat{S}_b] = \frac{1}{4}\hat{a}_i^\dagger [\sigma_a, \sigma_b]_{ij} \hat{a}_j = i\epsilon_{abc}\hat{S}_c \tag{D.45}$$

が確かめられる．従って，$\{\hat{S}_a\}$ は $SU(2)$ 代数の生成子であり，これを角運動量に対応させると，$\hat{a}_i|0\rangle = 0$, $(\langle 0|0\rangle = 1)$ で定義される基底状態は $\hat{S}_a|0\rangle = 0$ を満たし，$j = 0$ の状態となる．また，

$$\hat{S}_3 = \frac{1}{2}(\hat{N}_1 - \hat{N}_2), \quad (\hat{N}_1 = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1,\ \hat{N}_2 = \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \tag{D.46}$$

から，$i = 1, 2$ の励起数の差に $\frac{1}{2}$ を乗じたものが，角運動量の第 3 成分の固有値 m を決定する．さらに，$(\boldsymbol{\sigma})_{ij} \cdot (\boldsymbol{\sigma})_{kl} = \delta_{il}\delta_{jk} - \frac{1}{2}\delta_{ij}\delta_{kl}$ を用いると

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{S}}^2 &= \frac{1}{4}\left\{\hat{a}_i^\dagger (\boldsymbol{\sigma})_{ij} \hat{a}_j\right\} \cdot \left\{\hat{a}_k^\dagger (\boldsymbol{\sigma})_{kl} \hat{a}_l\right\} = \frac{1}{2}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_l \frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma})_{ij} \cdot (\boldsymbol{\sigma})_{kl} \\ &= \frac{1}{2}\left(\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i - \frac{1}{2}\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k\right) \\ &= \frac{1}{2}\hat{N}\left(\frac{1}{2}\hat{N} + 1\right), \quad (\hat{N} = \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2) \end{aligned} \tag{D.47}$$

を得て，全励起数の $\frac{1}{2}$ が角運動量の大きさ j を決定することが分かる．従って，シュウィンガーの $SU(2)$ 振動子に基づく角運動量の固有状態の表現が

$$
\begin{aligned}
|i, m\rangle &= \frac{(\hat{a}_1^\dagger)^{j+m}(\hat{a}_2^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle\,, \\
\hat{\boldsymbol{S}}^2|j,m\rangle &= j(j+1)|j,m\rangle\,, \quad \left(j=0,\frac{1}{2},1,\cdots\right), \\
\hat{S}_3|j,m\rangle &= m|\,m\rangle\,, \quad (\,m=j,j-1,\cdots,-j\,)
\end{aligned}
\tag{D.48}
$$

と得られたことになる．

さて，$j=\frac{1}{2}$ の基本表現の状態 $|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle\phi_1+|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\rangle\phi_2=(\phi_1,\phi_2)^T$ は，$\boldsymbol{n}$ 軸の周りの無限小回転 $\delta\theta$ の下で，$(i\sigma_2)\sigma_a=-\sigma_a^T(i\sigma_2)$ に注意すると，

$$
\delta\phi_i = i\delta\theta\frac{1}{2}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{ij}\phi_j\,, \tag{D.49}
$$

$$
\delta\phi^i = -i\delta\theta\frac{1}{2}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{ij}^T\phi^j\,, \quad (\,\phi^i=(i\sigma_2)_{ij}\phi_j\,) \tag{D.50}
$$

と変換される．ϕ_i, ϕ^i は，$\phi^i\phi_i$ をスカラー量とする，共変および反変スピノールである．一方，$\hat{a}_i^\dagger|0\rangle$ は，同じ無限小回転で

$$
\delta\left(\hat{a}_i^\dagger|0\rangle\right) = i\delta\theta\frac{1}{2}(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma})_{ij}^T\hat{a}_j^\dagger|0\rangle \tag{D.51}
$$

と変換されるため，$\phi^i\hat{a}_i^\dagger|0\rangle$ はスカラー量になる．そこで，$2j$ 個の反変スピノール ϕ_a^i, $(a=1,\cdots,2j)$ を用いたスカラー量の展開形

$$
\prod_{a=1}^{2j}\left(\phi_a^i\hat{a}_i^\dagger\right)|0\rangle = \sum_{m=-j}^{j}|j,m\rangle\Phi^{\overbrace{1,\cdots,1,}^{j+m}\ \overbrace{2,\cdots,2}^{j-m}} \tag{D.52}
$$

が導かれる．ここで $\Phi^{i_1,i_2,\cdots,i_{2j}}$ は，$\{\phi_a^i\}$ の積から作られる完全対称な $2j$ 階の反変スピノールである．(D.52) がスカラー量であることと，添字の上げ下げは $1,2$ の入れ替えを引き起こすことから，

$$
\Phi^{\overbrace{1,\cdots,1,}^{j+m}\ \overbrace{2,\cdots,2}^{j-m}} = \Phi_{\underbrace{1,\cdots,1,}_{j-m}\ \underbrace{2,\cdots,2}_{j+m}} \sim |j,-m\rangle \tag{D.53}
$$

と考えることができる．(D.53) が，$j=\frac{1}{2}$ の基本表現の完全対称積と角運動量の規約表現を結び付ける基本形である．

参考文献

[1] 量子力学の基本的教科書として，量子力学の本質を著した下記文献，標準的な優れた解説を含む [2]，また現代的な視点で書かれた [3] を挙げておく．

P.A.M Dirac, *The Principles of QUANTUM MECHANICS*, OXFORD UNIVERSITY PRESS (1963).

[2] ランダウ-リフシッツ (佐々木健・好村滋洋 訳), 量子力学 1, 2 (東京図書, 1983).

[3] J.J. Sakurai, J. Napolitano (桜井明夫 訳), 現代の量子力学 (第 2 版) ⟨上, 下⟩, 吉岡書店 (物理学叢書).

[4] 量子力学と場の理論の発展史に関わる文献として，初期の原論文を集めた下記文献と [5] を挙げておく．また，[6], [7], [8] は，量子力学の発展の過程を学ぶことのできる文献である．

B.L.Van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, Dover Books on Physics and Chemistry (1967).

[5] J. Schwinger (編集), *Quantum Electrodynamics*, Dover Books on Engineering and Rngineering Physics (1958).

[6] M. ボルン (鈴木良治・金関義則 訳), 現代物理学 (みずす書房, 1964).

[7] 高林武彦, 量子論の発展史 (筑摩学芸文庫, 2010).

[8] 広重 徹, 物理学史 II (培風館新物理学シリーズ 6, 1968).

[9] 量子力学における**因数分解法**は，下記の論文により確立された．[10] は，量子力学をこの視点から組み立てた個性的な著書である．また，この主題に関する比較的最近の著書として，[11] を挙げておく．

L. Infeld and T.E. Hull, *The Factorization Method*, Reviews of Modern Physics **23** (1951) 21.

[10] H.S. Green, *Matrix Mechanics*, P.NOORDHOFF LTD. (1965).

和訳：中川昌美 訳, ハイゼンベルク形式による量子力学 (講談社, 1980).

[11] S.H. Dong, *Factorization Method in Quantum Mechanics*, Fundamental Theories of Physics 150, Springer (2007).

[12] 本書は場の量子論まで扱っていないが，一部でゲージ場の量子化を取り上げた．これらを詳しく解説した文献として，下記を挙げておく．

九後汰一郎, ゲージ場の量子論 I, 新物理学シリーズ 23 (培風館, 1989).

[13] 超対称量子力学に関しては下記文献 [14]，および関連論文として [15] を挙げておく．

F. Cooper, A. Khare and U. Sukhatme, *Supersymmetry in Quantum Mechanics*, World Scientific (2001).

[14] G. Junker, *Supersymmetric Methods in Quantum and Statistical Physics*, Springer (1996).

[15] E. Witten, Nucl. Phys. **B188** (1981) 513.

[16] 量子論の波と粒子の二重性に関わる実験の文献として下記を挙げておく．また，不確定性関係の歴史的な文献として [17] を，関連する近年の話題として [18]–[21] を挙げておく．

G. Badurek, H. Rauch and D. Tuppinger, *Neutron interferometric double-resonance experiment*, Phys. Rev. **A34** (1986) 2600.

[17] W. ハイゼンベルク (玉木英彦, 遠藤真二, 小出昭一郎共訳), 量子論の物理的基礎 (みすず書房, 1973, 第 7 刷).

[18] M. Ozawa, Phys. Rev. **A67** (2003) 042105.

[19] J. Erhart, S. Sponar, G. Sulyok, G. Badurek, M. Ozawa, and Y. Hasegawa, Nature Phys. **8** (2012) 185.

[20] 渡辺優, 上田正仁, 量子推定理論による不確定性関係の定式化, 日本物理学会誌, Vol.71, No.6 (2016) 372.

[21] K. Fujikawa, Phys. Rev. **A85** (2012) 062117.

[22] 量子力学で必要とされる群論の解説として，下記文献および [23] を挙げる．また，[24] は角運動量の表現に限られているが，独創的で役に立つ解説を与えている．

佐藤光, 物理学特論 群と物理, パリティ物理学コース (丸善出版, 1992).

[23] H. Georgi, *Lie Algebras in Particle Physics, 2nd Edition*, Westview Press (1999).

[24] J. Schwinger, *On Angular Momentum*, Dover Books on Physics (2015).

[25] 経路積分の発見者であるファインマン自身が関わる経路積分の成書は下記，および [26] である．経路積分の様々な問題を網羅的に扱った文献として，[27], [28] が挙げられる．その他に，主に動径変数の経路積分を扱った論文として，[29]–[31] を挙げる．

R.P. Feynman and A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill Book Company (1965).

[26] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, W.A. Benjanin. Inc. (1972).

[27] H. Kleinert, *PATH INTEGRALS in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics, and Financial Markets (4th Edition)*, World Scientific (2006).

[28] C. Grosche and F. Steiner, *Handbook of Feynman Path Integrals*, Springer STMP 145 (1998).

[29] I.H. Duru and H. Kleinert, Physics Letters, **B84** (1979) 185.

[30] A. Inomata, Physics Letters, **A101** (1984) 253.

[31] F. Steiner, Physics Letters, **A106** (1984) 356.

[32] 確率過程量子化に関わる解説・論文集として，下記文献および [33] を挙げておく．

Stochastic Quantization, ed. by P.H. Damgaard and H. Huffel, World Scientific (1987).

[33] M. Namiki, *Stochastic Quantization*, Springer (1992).

[34] グラスマン変数を含む一般座標の正準力学が，下記で議論されている．

R. Casalbuoni, Il Nuovo Cimento, **A33** (1976) 115.

[35] ゲルファントの三つ組に関する文献として，下記および [36] を挙げておく．

A. Bohm and M. Gadella, *Dirac Kets, Gamow Vectors and Gel'fand Triplets*, Lecture Notes in Physics 348, Springer (1989).

[36] I.M. Gel'fand and N. Ya. Vilenkin, *Generalized Functions* Vol.4, Academic Press (1964).

[37] 特殊関数を含む数理物理の解説および公式集として，下記および [38] を挙げておく．
H.J. Weber and G.B. Arfken, *Essential Mathematical Methods for Physicists*, Elsevier Academic Press (2004).

[38] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and products*, Academic Press (1980).

人名索引

ワ

用語索引

欧字

ア

カ

サ

タ

ナ

ハ

マ

ヤ

ラ

ワ

著者略歴

仲 滋文（なか しげふみ）

1946年　三重県に生まれる
1974年　日本大学大学院理工学研究科博士後期課程物理学専攻修了
（日本大学理学博士）
1974年　東京大学原子核研究所研究員
1978年　Humboldt 奨学生（Univ. Karlsruhe F. Theoret. Physik）
2000年　日本大学理工学部教授
2014年　日本大学特任教授
現　在　日本大学理工学部，理工学研究所上席研究員
専　門　素粒子論

主要著書

『シュレーディンガー方程式—量子力学のよりよい理解のために—』
（サイエンス社，1999年初版）．

臨時別冊・数理科学 SGC ライブラリ - 134

『**量子力学の探究**　多面的理解で築く現代物理の基礎』

著　者　仲 滋文

2017年6月25日　初版発行

数理科学編集部　　発行人　森 平 敏 孝

TEL. (03) 5474–8816

FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp

ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp まで．

表紙デザイン：長谷部貴志

発行所 ©　株式会社 **サイエンス社**　TEL. (03) 5474–8500（代表）

〒151–0051　東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁